马氏体转变理论

邓永瑞 著

科学出版社

马氏体转变理论

邓永瑞 著



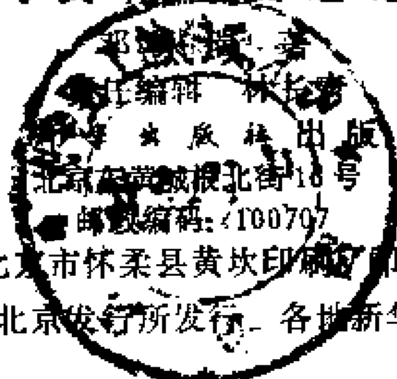
科学出版社

1993

（京）新登字092号

内 容 简 介

本书叙述著者研究马氏体转变的一些结果。第一章评述现行形核理论的成就和不足，并建议一个崭新的形核理论。第二、三章以界面推移为中心建立动力学唯象理论。第四章讨论热弹性马氏体长大，着重微观应力状态和整体弹性能分析。附录Ⅰ详述晶体学唯象理论的原理、应用和计算方法。附录Ⅱ为必需的数学力学基础。本书可供材料科学领域大学生、研究生以及科学研究和工程技术人员参考。



马 氏 体 转 变 理 论

邓永瑞 著
责任编辑 林长春
科 学 出 版 社 出 版
北京东黄城根北街16号
邮政编码：100707
北京市怀柔县黄坎印刷厂印刷
新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

1993年1月第 一 版　开本：850×1168 1/32
1993年1月第一次印刷　印张：8 1/8 插页：精2
印数：平1-770　字数：206 000
　　　精1-500

ISBN 7-03-003215-2/O·584（平）
ISBN 7-03-003216-0/O·585（精）

定价：压膜平装 9.80元
　　　纸面精装 11.20元

前　言

本书的内容是笔者近几年研究马氏体转变的一些结果。早在撰写博士论文时，就企图把实验数据纳入一个理论体系，并受到当时走红的Landau理论的吸引。但很快认识到，尽管这一理论在二级相变上很成功，但一级相变并不存在真正的序参量，勉强使用“应变”或“结构参量”，既不能描述局域的转变状态，又不能描述整体的转变进程。转变体系清楚地分为两部分，“序参量”为1的马氏体和为0的母相，而两者相对量明白地表示转变进程。因而，采用再简单不过的马氏体百分数为自变量的动力学唯象理论，成为第二章的内容。

要使这种与实验“拟合”的理论有生命力，一方面要建立更深刻的理论基础，另一方面能应用于未知数值的定量计算。这个理论用于计算界面推移摩擦时，得到了肯定的定量结果；在物理基础方面，把摩擦函数的准焓和准熵与界面结构及其特征张量D——平面不变应变张量——联系起来，建立了更牢固的基础。从而，表征动力学特点的准焓和准熵，有可能从晶体学参量（通过张量D）算出，反之亦然。这种把动力学理论与晶体学理论结合起来的尝试，构成了第三章的内容。

马氏体转变就是相界面推移过程，马氏体形核自然被考虑为界面形成或其特征张量D出现并适当分布的过程。换言之，马氏体形核就是由张量为零的母相经骚动（变化的挠率张量表征的形核区）而达到张量规则分布的马氏体、相界面和母相共存状态的过程。张量D在马氏体转变中自始至终起关键作用，其可“稀释”的本质特点，使形核成为低能垒或无能垒过程，同时又提供了晶体学唯象理论的基础。这些讨论构成了第一章的内容。上述顺序是笔者的认识过程，但在介绍时的章节安排，却是　马氏体转变的自然

顺序。

第四章讨论马氏体长大，基本上是实验结果的归纳和弹性理论数值计算的尝试。马氏体长大过程基本上受弹性能的控制，其大小、分布、不均匀性和变化趋势，均起重要作用。这一章对局域弹性能采用数值计算，对整体弹性能用实验数据分离求值，虽然各有进展，但这两者尚未完全沟通。将来需在力学家的指教和帮助下，再作深入的研究。

本书不是完善的理论著作，只是探索性理论思考，缺点错误必然甚多，任何批评指正都受欢迎。为勇于攀登的年青材料科学工作者提供一点参考或启发，是撰写本书的初衷。笔者的科学研究得到国家自然科学基金会（No.5860256和59071058）和冶金工业部（军工办和教育司）的大力支持，得到师友的指教和亲人的帮助，不胜感激。作为50年代的大学生和80年代的留学生，笔者是在新中国和党的阳光雨露下成长的；虽然材料科学的道路艰难，在跋涉中时感疲累不堪，时感寂寞难耐，但未敢自惜，总奋力前行，以报答祖国母亲的养育之恩，并无愧于献身科学前辈的侠骨与舍生异域学友的英灵。

本书的主要内容先以英文形式出版（1991.4），以后收到Cohen教授的来信，指教参考资料。对这位前辈大师的学术造诣、道德风范，笔者不胜景仰。在写书过程中弟子应世华和曹国英等同志给予了许多帮助，在此一并致谢。

邓 永 瑞

1991.12.北京

马氏体转变的基本特点

1. 相变无扩散（点阵对应性）

2. 转变应变以切应变为主

3. 两相的界面保持共格

4. 两相有取向关系

5. 新相有惯习关系

6. 能量学有利（低形核能垒）

7. 转变有可逆性（非经典热力学可逆平衡）

8. 逆转变有热滞（界面推移摩擦）

（7，8为热弹性马氏体转变的特点）

本书主要公式

平面不变应变

$$\mathbf{D}=\mathbf{I}+\mathbf{d}\mathbf{p}'$$

$$\mathbf{D}=\mathbf{RBS}$$

自由能函数

$$F_n=a+b\Omega+c\Omega^2+e\sigma\Omega$$

动力函数

$$F_d=A+B\Omega+C\Omega^2+D\Omega^3+\Omega^4$$

摩擦函数

$$F_r=H_r-TS_r$$

摩擦准焓

$$H_r=-V_m\varepsilon_d\sigma_d$$

摩擦准熵

$$S_r=\kappa\ln\omega$$

$$\omega=(\sum a_i)!/\Pi(a_i!)$$

本书所用符号

符号	含义
$\mathbf{R}$	刚体旋转张量，正交矩阵
$\mathbf{B}$	Bain畸变张量，对角矩阵
S	简单切变张量，行列式值为1的矩阵
1、δ_{ij}	单位矩阵，单位张量
$\mathbf{d}$	不变面位移矢量
$\mathbf{p}'$	不变面法线矢量
Ω	马氏体百分数
σ	外加应力
H_f	摩擦准焓
S_f	摩擦准熵
V_m	摩尔体积
e_d	界面中的转变应变
σ_d	界面中引起转变应变的应力
κ	界面熵常数
ϖ	晶体小面排列成界面的方式总数
M_s	马氏体转变的开始温度
M_f	马氏体转变的完成温度
A_s	逆转变的开始温度
A_f	逆转变的完成温度
T_0	母相与马氏体转变的平衡温度

目　录

第一章　马氏体形核理论

1.1　引　　言

早期的马氏体，是指钢中淬火得到的坚硬的组织状态，为碳在铁中的过饱和固溶体，呈体心四方点阵。现代的马氏体，是上述概念的推广，指通过马氏体转变机理而生成的产物。马氏体转变机理的最主要特点，是无扩散和切变，此外还有母相和马氏体的点阵有取向关系，马氏体的出现沿母相一定的晶面（惯习关系），以及母相和马氏体在界面上的共格关系等等。马氏体转变可以强化金属，可以韧化陶瓷，还是新型合金形状记忆合金的基础，因而其理论和实践意义是巨大的。Cohen 教授指出[1]，马氏体转变可能是自然界最为神奇美妙的过程之一。马氏体转变还可能在生理和生命过程中起重要作用[2]。因而，马氏体转变自然被认为是材料科学中最重要的转变之一，也是研究工作最为活跃的领域之一[3]。

马氏体转变由形核和长大两过程组成，由于转变的巨大速度（以10^{-6}s度量），深入细致地观察和实验研究这一过程是很困难的，尤其是形核，因而透彻而系统的了解仍然甚少。相对于马氏体转变的形貌学、晶体学方面的众多实验结果和巨大进展，在热力学、动力学和机理方面的研究和成果相对薄弱。本章将专门研究形核过程，介绍原有的理论，加以分析评价，然后建议一个新的理论模型框架，作为可能的发展方向之一。

马氏体形核理论的现状是不能令人满意的。除早期Cohen等建议的，认为马氏体核是由高温时的晶胚"冻结"形成的观点，为多数材料学家认为不甚可能外，现在有两种流行的理论，一是Olson和Cohen为代表的经典形核理论，基于晶体中的缺陷（位

错、层错）的特殊组态[4-11]，一是Clapp等人的软模理论，基于点阵的热振动和弹性失稳[12-18]。这两种理论都有缺陷，不能完全令人满意地说明形核过程。

本章的主要目的是介绍一种新的马氏体形核模型，能在一定程度上克服上述两理论的不足，并与两者兼容。这一新理论与马氏体转变的晶体学唯象理论[19-25]有密切联系，其核心是平面不变应变，认为这一应变在形核和长大过程中均起控制作用。对这新的形核模型有如下的主要考虑：参与形核的是一个较大的原子范围，例如10^6个原子的区域，并采取集体的和规则的移动；母相和马氏体之间不是明锐的界面，而是一个渐变和漫散的过渡层，厚度可达上百个原子间距，此层为一低应变的平面不变应变层；马氏体片沿平面不变应变的不变面析出，而平面不变应变又可以"稀释"而降低弹性能，从而降低形核能垒。

本章将先介绍Olson-Cohen经典形核模型[4]，然后是Clapp的软模型核模型[15]，作为两类理论的代表，也简略地提到其他理论模型，最后介绍新形核理论。这仅仅是一个概略的框架，因为这一理论正在发展之中。

1.2 经典形核理论

1.2.1 均匀形核理论的困难

马氏体是一种介稳相，只有通过高温母相经快速冷却才能得到，在适当的温度下回火或时效可转变为平衡相或脱溶出第二相。马氏体作为一个独立的单相，其Gibbs自由能可写作

$$G_m = H_m - TS_m \tag{1.1}$$

其中G，H和S分别表自由能、焓和熵，下标m表马氏体。用下标p表母相，则母相的自由能

$$G_p = H_p - TS_p \tag{1.2}$$

在极低的温度下，例如近于绝对零度时，$H_p > H_m$，而在马氏

体转变的温度范围，$S_p > S_m$。于是（1.1）和（1.2）式将显示图1.1的自由能曲线。T_0是两相间的热力学平衡温度，但马氏体转变并不开始于T_0，而开始于更低的温度M_s，因为需要一个温度间隙（过冷）以产生相变驱动力，来克服转变所伴随出现的两相界面能和弹性应变（畸变）能。

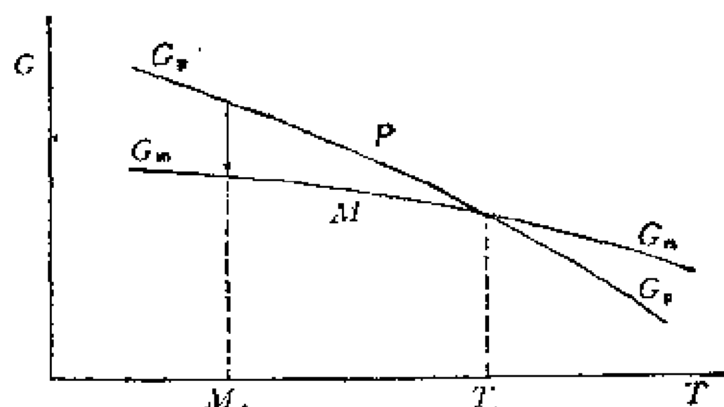


图 1.1 母相和马氏体的自由能曲线

按照Kaufman和Cohen [7,26-28] 的讨论，对于母相中出现一个扁球形的薄片马氏体，如图1.2所示，其自由能变化为

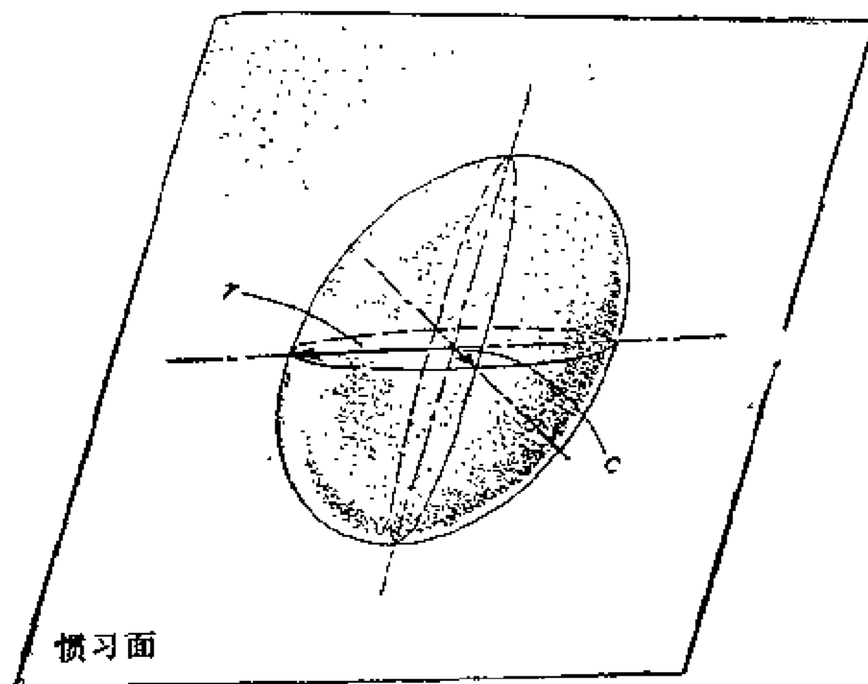


图 1.2 扁球状的马氏体晶胚 [7]

$$\Delta G = \frac{4}{3}\pi r^2 c\cdot\Delta g + \frac{4}{3}\pi r^2 c\left(\frac{Ac}{r}\right) + 2\pi r^2\sigma_0 \quad (1.3)$$

$$A \approx \mu(\gamma^2 + \varepsilon_n^2) \quad (1.4)$$

其中r和c分别为扁球薄片的半径和半厚，Δg是单位体积的两相Gibbs自由能差，σ_0是单位界面面积的界面能，γ和μ分别为转变的切应变量和切变模量，而ε_n是转变的体积应变。（1.4）式是Cohen教授1980年5月在北京航空学院讲课提出的，见文献[27]。更为准确的表示是

$$A = \frac{1}{2}\mu(\gamma_{xy}^2 + \gamma_{xz}^2 + \gamma_{yz}^2) + \mu(\varepsilon_x^2 + \varepsilon_y^2 + \varepsilon_z^2) + \frac{1}{2}\lambda\Delta^2 \quad (1.5)$$

$$\Delta = (1+\varepsilon_x)(1+\varepsilon_y)(1+\varepsilon_z) - 1 \approx \varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z$$

其中λ为Lamé常数。图1.3示出形核功ΔG随r和c的变化[7]，可以看出，一个鞍形点对应于临界核尺寸与临界核形功，也即形核

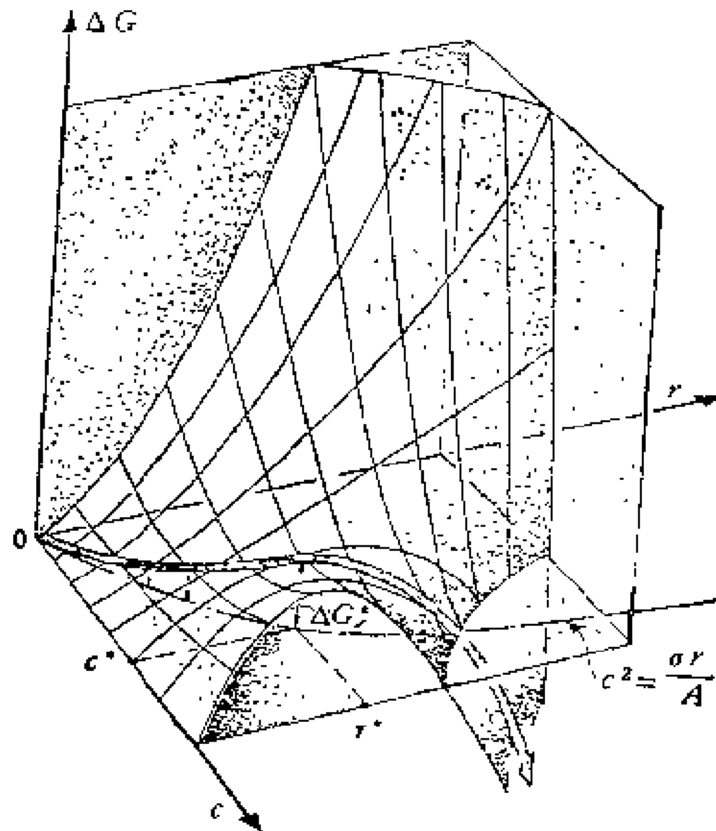


图 1.3 马氏体晶胚的自由能差ΔG随半径r和半厚c的变化
双线箭头示出最小能量途径[7]

能垒。这一能垒可计算如下[7]：

$$\frac{\partial \Delta G}{\partial c}=0, \quad \frac{\partial \Delta G}{\partial r}=0$$

$$c^{*}=-\frac{\partial \sigma_{\circ}}{\Delta g} \tag{1.6}$$

$$r^{*}=\frac{4A\sigma}{\Delta g^{2}}=\frac{c^{*2}A}{\sigma_{\circ}}$$

$$\Delta G^{*}=\frac{32}{3}\pi\left(\frac{A^{2}\sigma_{\circ}^{3}}{\Delta g^{4}}\right)$$

由图1.2可以看到一个形核过程的最佳途径，也即保持单位体积晶胚的形成功ΔG相对于r和c为最小，可示于图1.4中，并得到r和c的关系为

$$\frac{c^{2}}{r}=\frac{\sigma_{\circ}}{A} \tag{1.7}$$

这是r和c的最佳配合，以得到最低的界面能和畸变能的配合。换言之，如果c相对于r大于此值，即更近于球形，则弹性应变能急剧上升；而如果c相对于r小于此值，即更近于薄片，则界面能急

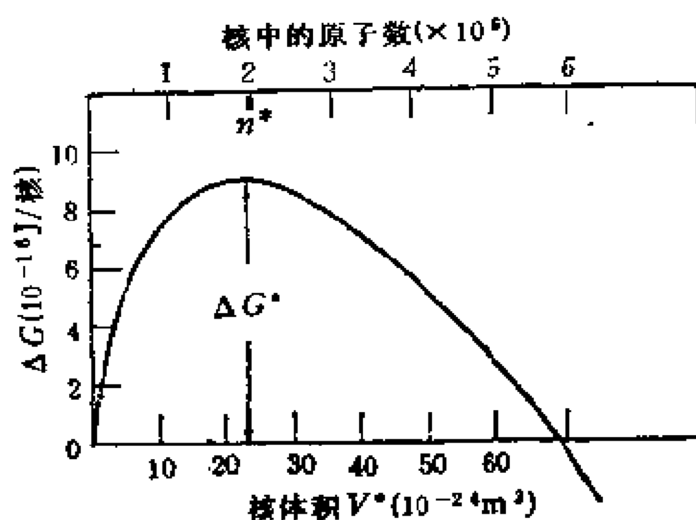


图 1.4 保持最佳形状下马氏体的自由能随体积的变化[7]
$\Delta G^{*}=9\times10^{-16}$J/核
$V^{*}=22\times10^{-24}\mathrm{m}^{3}=1.8\times10^{6}$个原子

剧上升。

Cohen[6]详细地讨论了Fe－30%Ni（原子）中的相应数据。如图1.5所示，合金的M_s为233K（－40℃），过冷200K低于T_0，$\Delta g=-1318.8$J/mol(1cal＝4.184J)，见Kaufman和Cohen的文献[23]。为了估计界面能σ_0，可采用母相和马氏体间界面的Frank的位错模型[29]，即认为具有{225}惯习面的马氏体界面上排列着螺位错。Knapp和Dehlinger[30]改进这一模型使马氏体片为位错环所围绕，如图1.6所示。按这一模型，界面能即为位错排列的弹性能，可估计其在$\sigma_0=0.15-0.33$J/m²范围，下面用0.2 J/m²。

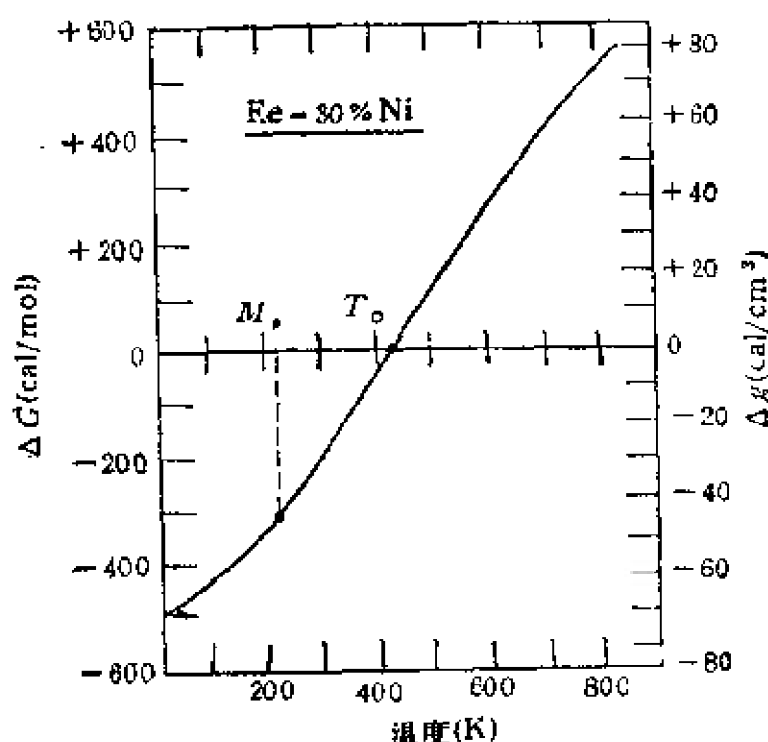


图 1.5 Fe-30%Ni（原子）合金的马氏体转变的化学自由能变化[7]

弹性应变能的估计取决于因子A。由Fisher，Hollomon和Turnbull[31]与Knapp和Dehlinger[30]分别独立作出的估计很相近，均估计A约为2×10J/m³。应变能$\frac{4}{3}\pi rc^2A$是由转变的宏观位移引起，而不是前面提到的位错环的不均匀切变引起，后者已计入界面能项中。按Cohen[7]的计算，在（1.6）式中代入

上述估计值则得

$$c^{*}=[illegible].2\text{nm}$$

$$r^{*}=[illegible]49\text{nm} \qquad (1.8)$$

$$\Delta G^{*}=9\times 10^{-16}\text{J/核}=5.4\times 10^{8}\text{J/mol}$$

这样估得的临界核约含 2 百万个原子，而形核功则高得惊人，比相应温度的热能（$RT\approx 2000$J/mol）高出 5 个数量级以上。在1980年 5 月，Cohen在北京航空学院讲学时，再次重申这一观点，即形核功比热能高出 5 个数量级以上[27]。

由于这一临界形核功如此之高，有必要认真核查一下Cohen的计算[7,28]，特别是弹性应变能部分，以找出临界核形成功极高的关键原因。按 Fisher等[31]对弹性能的考虑，基于扁球状薄片，半径为r，半厚为c，弹性能分布在半径 r 的球形体内，单位体积的弹性能E_v正比于$(c/r)^2$，因而球体的总弹性能为$\frac{4}{3}\pi rc^2A$，其中

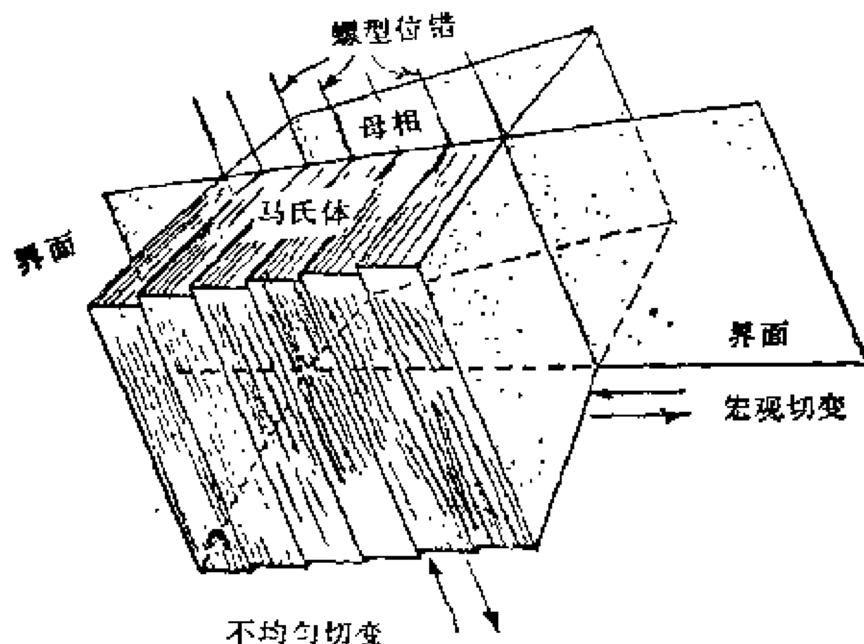


图 1.6 界面由位错构成的马氏体晶胚模型[7]

A为比例常数。切应变近似地为$\gamma=\varphi c/2r$，其中φ为马氏体的均匀切变角，则单位体积能量为

$$E_v=\frac{1}{2}\mu y^2=\frac{1}{8}\varphi^2\mu\left(\frac{c}{r}\right)^2 \quad (1.9)$$

总弹性能

$$E=\frac{4}{3}\pi r^3 E_v=\frac{1}{6}\pi\varphi^2\mu r c^2 \quad (1.10)$$

与 $E=\frac{4}{3}\pi r^2 cA$比较，则

$$A=\frac{1}{8}\mu\varphi^2 \quad (1.11)$$

按Nishiyama[32]的马氏体与奥氏体取向（西山关系），则$\varphi=0.34$，铁素体$\mu=80$GPa，得

$$A\approx 2\times 10^9 \text{J/m}^3 \quad (1.12)$$

这里尚未计入体积应变ε_n引起的弹性能部分。推导中令单位体积的弹性能正比于$\left(\frac{c}{r}\right)^2$以及等于$\frac{1}{2}\mu y^2$时，均假定了均匀应变，这可能需更严密的论证。按照Eshelby的弹性理论[33-35]，在马氏体为严格的旋转扁球形时，此结论是基本成立的。Knapp和Dehlinger[30]从另一角度也得出类似的结果，单位体积弹性能

$$E_v\approx 2\left(\frac{c}{r}\right)\times 10^9 \text{J/m}^3 \quad (1.13)$$

由此可见，弹性能高的原因在于：在一个相当大的球形体积内，（10^6原子数量级）存在一个相当大的均匀弹性切变场（例如切应变0.34），这些弹性能均由一个直径为数百原子间距离、厚为几个原子间距的临界马氏体晶核引起，这是形核功很高的关键性原因之一。

但即使把这些原因全部考虑在内，形核功仍然显得过高，这里似乎还存在别的问题。从（1.8）式看来，每个核的形成功是9×10^{-16}J，1mol核为5.4×10^8J（这里Cohen意指6.022×10^{23}个核为1mol）。但因1个核的原子数为2百万个，其热能不应是KT（这是1个原子的热能），而是2百万个KT，即$2\times 10^6 KT$数量级，

相对于1个核的形成功，是差不多的数量级．笔者的看法，用1个含2百万个原子的晶核的形成功与1个原子的热能比较，似乎是不妥的，这是一个疑问．

1.2.2 Olson–Cohen模型，非均匀形核

1．模型

Olson和Cohen[4]建议了一个基于位错和层错的特殊组态的马氏体形核理论模型，是早先Bogers和Burgers[36]对马氏体转变"刚球模型"的发展．Olson–Cohen 模型能解释马氏体形核理论的难点——能量学问题，因而受到重视，成为目前被广泛承认的理论模型；同时它承继了 Bogers-Burgers 模型中两相晶体学关系，对取向有令人满意的说明．这一理论的最大缺陷是不能说明惯习关系．这可能同他们处理与马氏体转变的晶体学唯象理论的关系有关．他们在论文[4]中指出："唯象理论的某些特点可能不完全适用于形核问题"；"不变平面（存在）的条件可能不是非常细小的质点所必须的，特别是一个质点受已存在缺陷的应变场统治之下的情况"；"（唯象理论）不处理点阵形变的机理，而这种形变机理可能对晶胚的形成问题有特殊的重要性"．笔者不同意这些观点，并认为这正是他们的模型不能说明惯习面这一马氏体转变的重要特征之一的根本原因，但首先要介绍他们的模型．

这一模型的主要考虑如下：（1）形核的第一步是母相密排面上的层错，其位移由已存在的缺陷导出，这一步保证形核在能量学上的可能性．（2）下一步是发生形核过程，并使层错面不发生转动；这保证母相和马氏体的晶体学取向关系．现在把这些过程详细说明于下，主要以面心立方点阵到体心立方点阵的马氏体转变为例．

Bogers和Burgers[36]曾建议了一个马氏体转变的刚球模型，示于图1.7—1.10中．图1.7示出面心立方点阵的正常堆垛（a），中间状态（b）及内禀层错（c）．图1.8示出面心立方点阵中最密面{1 1 1}形成的四面体，以及其中一个最密面SVQ．若四面体

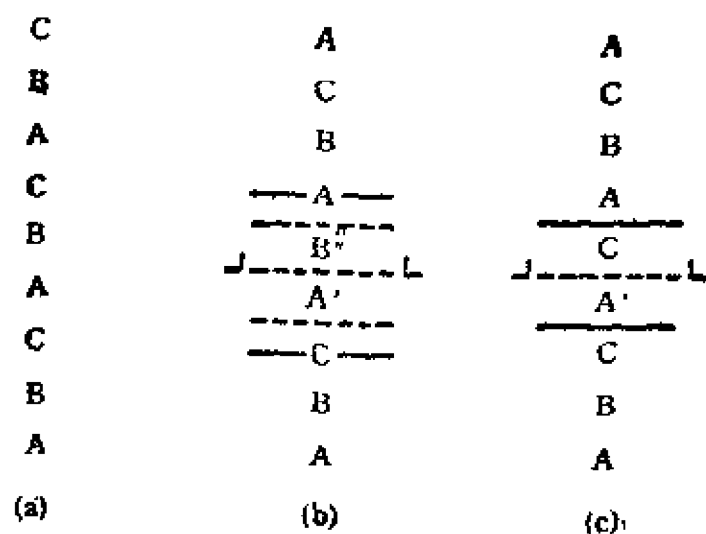


图 1.7　面心立方点阵中的堆垛序列和堆垛层错[4]

(a) 正常的F.C.C堆垛

(b) F.C.C→B.C.C的中间结构

(c) 内禀层错

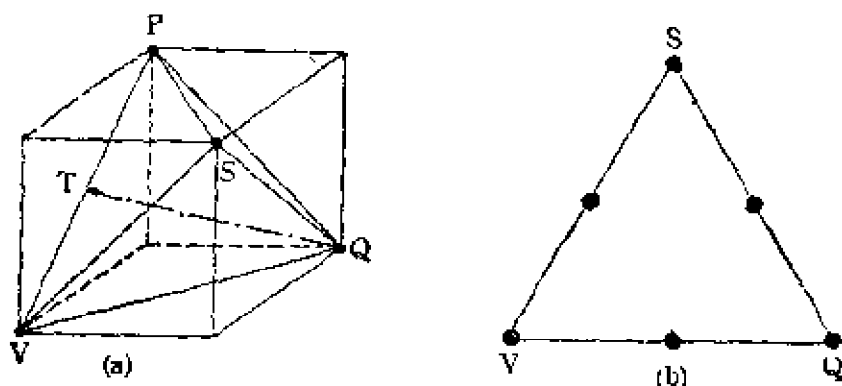


图 1.8　面心立方点阵中{1 1 1}面族构成的

(a) 四面体和

(b) 最密面

逐渐发生如图1.9所示的切变，则达到一个新的稳定低能位置相当于孪晶 $\frac{1}{6}[1\ 2\ 1]a$，(a为点阵常数，以后的位移或方向不再标a)。在切变过程中，当切变矢量为$\frac{1}{18}[1\ 2\ 1]$时，此时四面体

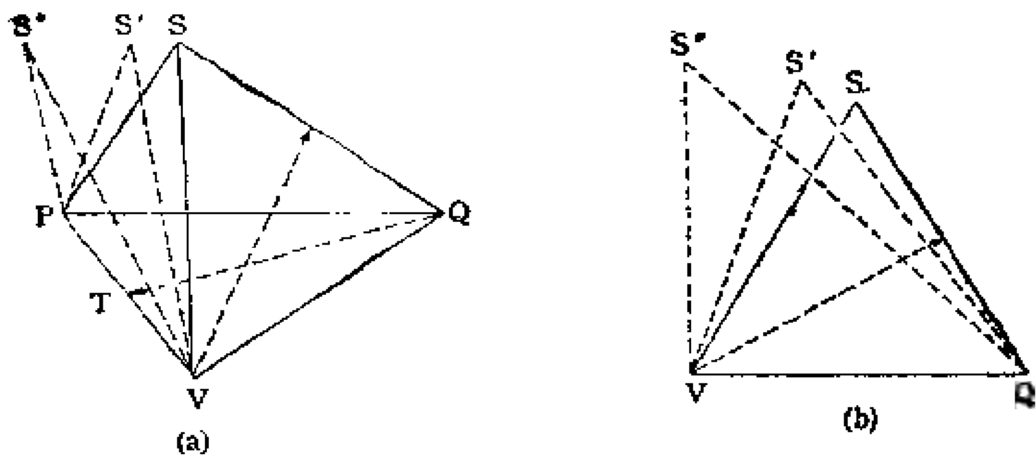


图 1.9 Bogers-Burgers第一次切变[36]
(a) 切变过程和 (b) 不同的切变量

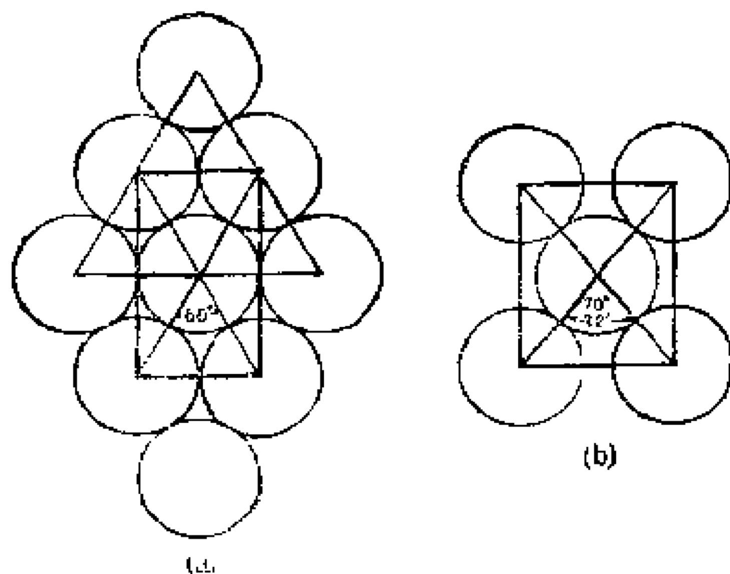


图 1.10 面心立方点阵的{1 1 1}面和体心立方点阵的{1 1 0}面

的SVQ面的原子排列相同于一个体心立方点阵的{1 1 0}面排列，如图1.10所示．四面体的整个切变过程的外观立体图示于图1.11中．可以看出初态是面心立方点阵的最密面（刚球）的堆积，终态是一个$\frac{1}{6}$[1 2 1]孪晶，而中间态则是由一层层切变的



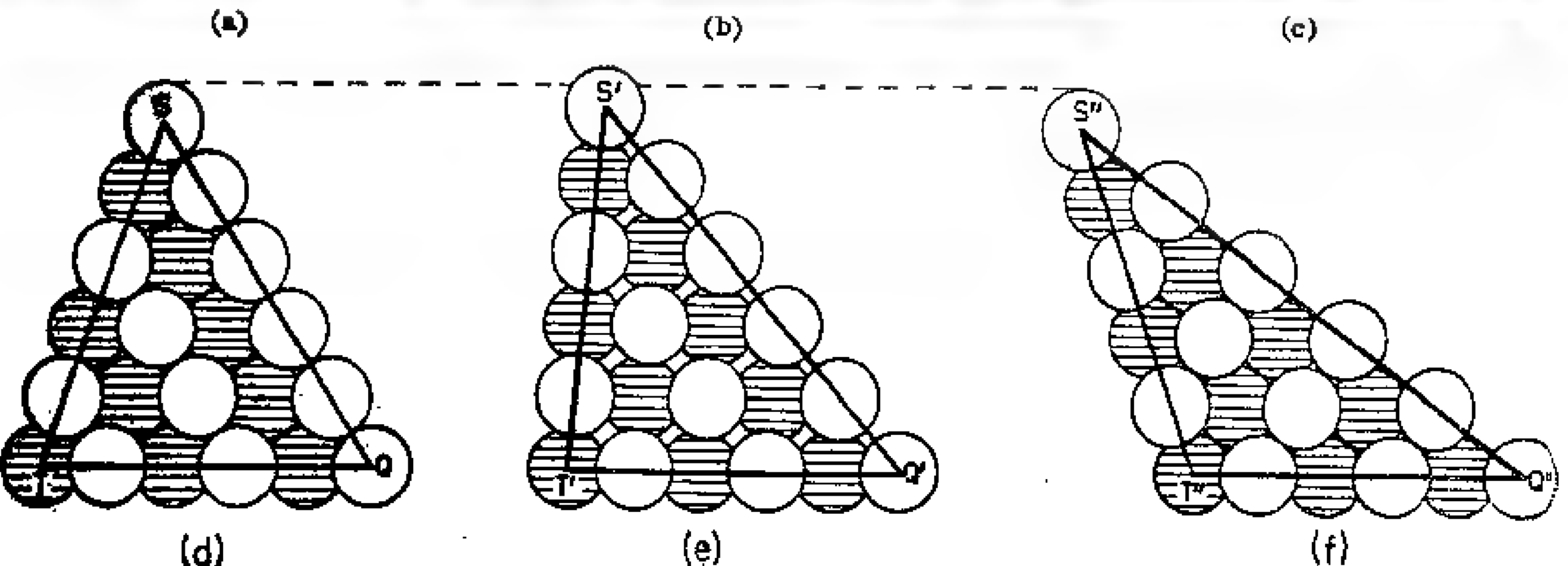


图 1.11 面心立方点阵切变过程的刚球模型 [36]
(a) 四个{111}面构成的四面体排列
(b) 三分之一的孪生时的中间结构
(c) 完成孪生切变后的最终排列
(d), (e), (f) 穿过{1 1 0}面TQS垂直PV的横截面图

SVQ面、也即体心立方点阵的{1 1 0}面叠成。但这种中间态并不是体心立方点阵，因为这些平行的{1 1 0}面的重叠位置，与正常的体心立方点阵不同，如图1.12所示。此时尚需第二次切变才能由这种中间状态成为体心立方点阵。若把中间切变态的SVQ定为体心立方的(1 1 0)面，则第二次切变必须在(1 1 0)面上沿[1 1 0]方向切变$\frac{1}{8}$个体心立方的点阵常数，即$\frac{1}{8}$[1 1 0]。但为了保持层错面不转动（以得到正确的点阵取向关系），第二次切变必须作如下调整，如图1.13所示，层间必须切变$a=\frac{1}{8}$

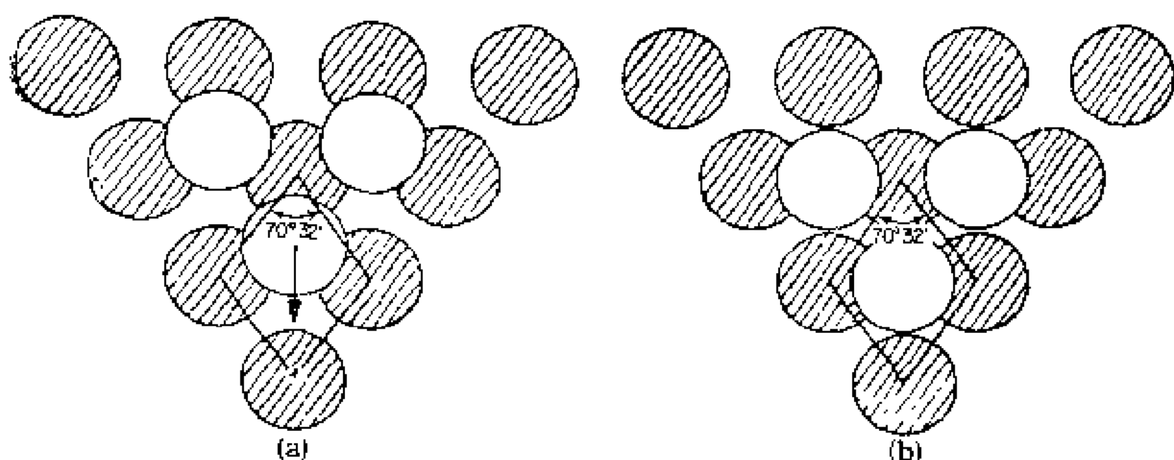


图 1.12 Bogers-Burgers第二次切变[16]
VQS的相对位置在 (a) 第二次切变前和 (b) 切变后

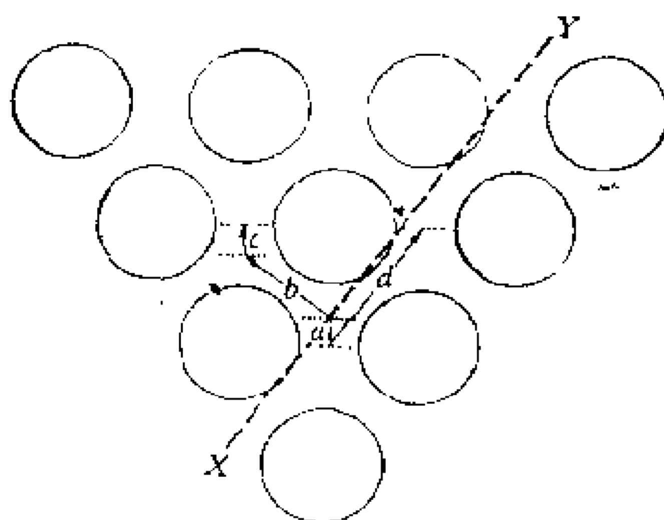


图 1.13 体心立方点阵中{1 1 0}面交替切变位移以保持Bogers-Burgers第一次切变的结果[4]

$[1\ \bar{1}\ 0]$以得到体心立方点阵，但 a 中垂直于XY的分量将引起转动，故必须每到第 8 层，发生$b+c$的切动，则可抵消以上 7 层中 a 引起的转动。

若这两次切变均由位错来实现，则由面心立方点阵到体心立方点阵需要两组位错：面心立方中的$\frac{1}{18}[1\ 2\ 1]$型和体心立方中的$\frac{1}{8}[1\ 1\ 0]$型。由于这两种位错都不是晶体中常见的不全位错（更不是完全位错），自然只能通过位错反应来获得。在面心立方中的最小晶体位错为$\frac{1}{2}[1\ 1\ 0]$，因而

$$\frac{1}{2}[1\ 1\ 0] \to \frac{1}{6}[1\ 2\ 1] + \frac{1}{6}[2\ 1\ \bar{1}] \qquad (1.14)$$

是一种在能量上可能的分解（取决于两不全位错之间的层错能）。如果每 3 层相邻的$(1\ 1\ 1)$面有1个$\frac{1}{6}[1\ 2\ 1]$位错，或者说每个位错漫延于 3 层面上，则每层上有 1 个$\frac{1}{18}[1\ 2\ 1]$位错。这正是第一次切变所需要的。在体心立方点阵中的晶体位错为$\frac{1}{2}[1\ 1\ 1]$，可发生下列分解

$$\frac{1}{2}[1\ 1\ 1] \to \frac{1}{8}[1\ 1\ 0] + \frac{1}{4}[1\ 1\ 2] + \frac{1}{8}[1\ 1\ 0] \qquad (1.15)$$

从而得到第二次切变所需的位错$\frac{1}{8}[1\ 1\ 0]$。这个位错等价于面心立方点阵中的$\frac{1}{16}[1\ 2\ 1]$。这样得到的马氏体晶胚，显然具有Kurdjumov–Sachs取向关系

$$(1\ 1\ 1)_{fcc} /\!/ (1\ 0\ 1)_{bcc};\ [1\ \bar{1}\ 0]_{fcc} /\!/ [1\ \bar{1}\ 1]_{bcc} \qquad (1.16)$$

因而这一模型得到与实验结果一致的取向关系。

2. 相界面

由于母相和马氏体间的界面本身具有的界面能，以及存在于界面附近的弹性应变能，是马氏体形核的主要障碍，因而任何一个马氏体形核模型应对界面的结构和特点有清楚的说明。Olson-Cohen的模型[4]认为母相和马氏体之间的界面是由位错排列而成，这与Frank[29]，Knapp-Dehlinger[30]的观点相同，但Olson-Cohen模型对界面位错作了更细致的说明。图1.14示出界面与位错的关系。图（a）为扁球形的新相质点出现，A和B晶面在穿过界面时是连续的。图（b）示出界面上的不全位错排列，此时有位错存在，但晶面保持连续性，而界面保持完全共格。图（c）把扁球形新相通过位错滑动变为矩形新相质点，更便于区分两类不同的共格界面："无位错"界面Ⅰ代表"无应力"共格，而界面Ⅱ代表"强制弹性"共格，界面必须存在特定的位错排列，被称为共格位错或转变位错。这类位错只能在位错环的面（即A面）上滑动，但其Burgers矢量可能同时具有滑移和攀移分量，但此时的攀移属保守运动，因只改变点阵常数而不产生空位或间隙原子。界面上还可能存在另外一类位错排列，不改变点阵类型，但产生不均匀形变。这种位错是晶体中的常规位错，攀移时为非保

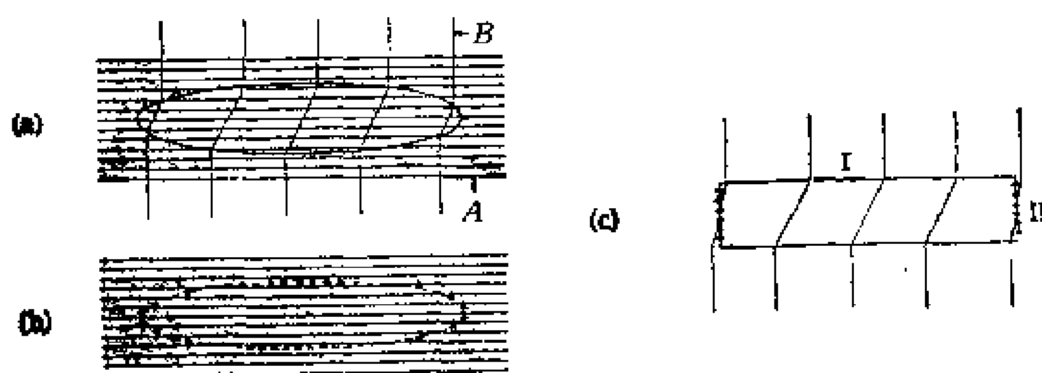


图 1.14　共格关系[3]

(a) 不连续点阵中的椭圆质点

(b) 界面上位错的位置

(c) 方形化后分离无应力共格界面与强制共格界面

守运动。这类位错主要的作用是降低弹性畸变能，被称为错配位错或反共格位错。这两类相界面位错可总结于表1.1中[8]。

表 1.1 界面位错的特点

	共格位错	反共格位错
又名	转变位错	错配位错 调节位错
作用	点阵应变 (转变为新点阵)	点阵不变应变 (降低应变能)
对共格的影响	保持共格及点阵 对应性	降低共格 破坏点阵对应 关系的均匀性
Burgers矢量，运动	不全格矢b' 在位错环面上作保守 性攀移或滑动	点阵格矢b 保守性滑动； 非保守性攀移

若产生马氏体转变的点阵应变表为一个纯粹应变 B和一个刚性旋转R的乘积，然后此应变又宏观地被一点阵不变应变P部分地抵消，则总应变量可写作[19, 20]

$$\mathbf{E}=\mathbf{RBP} \tag{1.17}$$

或把点阵应变化为

$$\mathbf{RB}=\mathbf{EP}^{-1} \tag{1.18}$$

其中$\mathbf{P}^{-1}$是一个均匀的"补充切变"，表点阵应变中被 P 抵消的部分。下面这一句[8]中的论断至关紧要："若E是平面不变应变，则应变能为极小"。可惜这一论断在文献[8]以及其所引用的文献[19，20]中均无进一步论证，据笔者看来，这一论断含义不明晰，而要论证也是（至少是）困难的。

上述这些应变均可各用一种界面位错的排列来表示，如图1.15。图11.5（a）和（b）中的共格位错排列分别实现应变E和$\mathbf{P}^{-1}$，两者合在一起产生点阵应变 RB。这两种位错的均匀排列可包含于马氏体的共格晶界中，但图（c）的非均匀的反共格位错

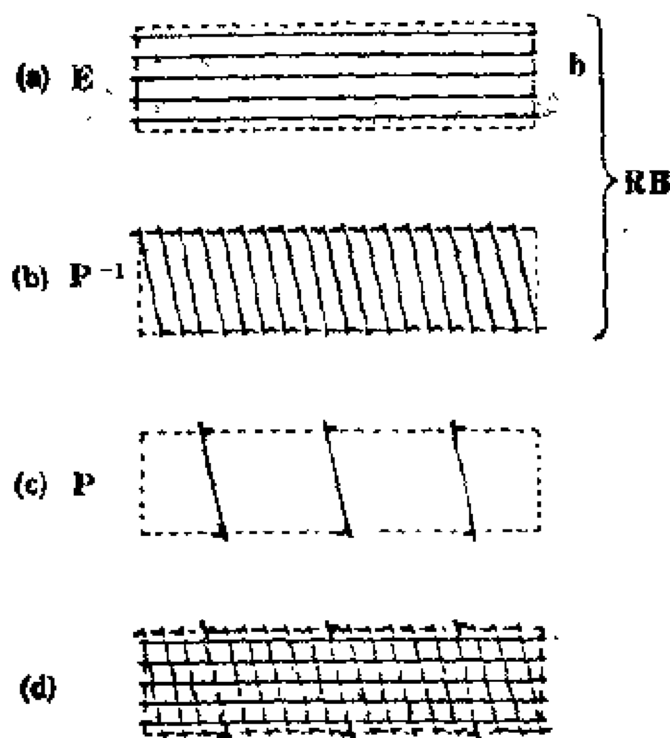


图 1.15 马氏体界面的位错排列[8]

(a) 共格位错产生的形变

(b) 共格位错产生的形变

(c) 反共格位错产生的形变

(d) 整个界面的结构

叠加，使界面变为半共格界面，如图（d）所示．对于一个上节讨论的由面心立方点阵到体心立方点阵的马氏体转变，其晶核及边界的位错结构模型，示于图1.16中．可以看出，这里把转变所需的位错组态及界面位错结构完美地统一起来了．

3．能量学

马氏体形核的最大难点，是对能量学的说明，因按前面的计算，马氏体的均匀形核需要极为巨大的能量作为驱动力，这样巨大的能量是不可能从相变自由能下降及热涨落获得，因面Olson-Cohen建议了上述的非均匀形核模型．如图 1.11 所示，在一个面心立方点阵的适当的位错层错组态下，层错区域内可能出现马氏体的体心立方点阵，这样一来，马氏体的形核能垒，将会极大地下降，在一定条件下可降至零或负值，使马氏体的不均匀形核

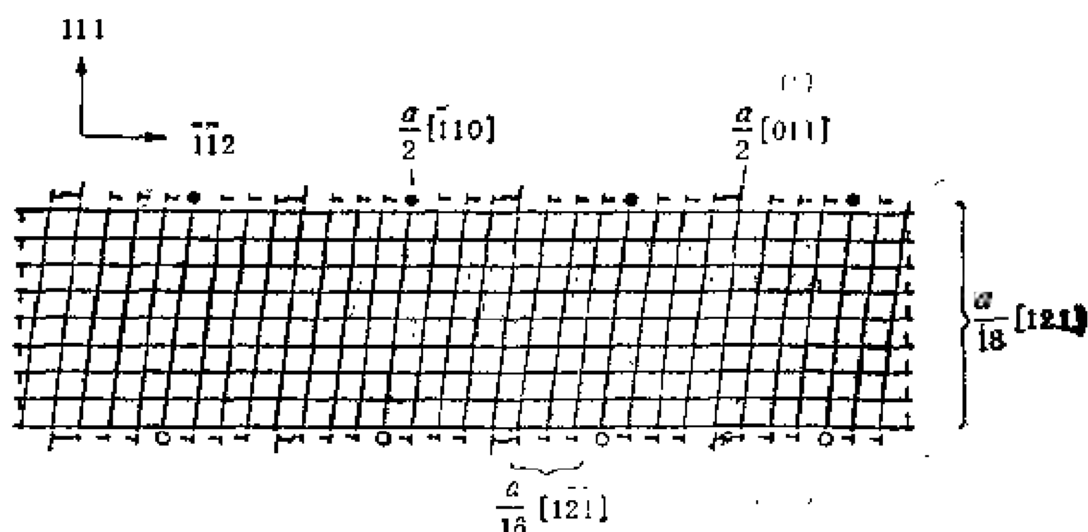


图 1.16 面心立方点阵到体心立方点阵转变形核模型的界面结构示意图[8]

得以进行。

在Olson-Cohen模型中，把层错区当作马氏体相的晶胚，因而有体积自由能及界面自由能变化，这两者都密切地与层错能及不全位错的弹性能相联系。图1.17（a）示出面心立方点阵最密面的正常的ABC堆积顺序，（b）和（c）分别示出内禀层错（缺少一B层）及外禀层错（多嵌入一个C层）。内禀层错可由单个Shockley不全位错在密排面上运动形成，相当于一个厚为2层的密排六方点阵相的晶胚。外禀位错由Shockley位错在相邻两密排面上运动生成，相当于一个2层厚的孪晶晶胚。设新相与母相的Gibbs自由能差为ΔG_{c}，每mol新相的应变能为E_{s}，单位面积的界面能为σ_{c}，则厚度为n层的这种层错晶胚的层错能为

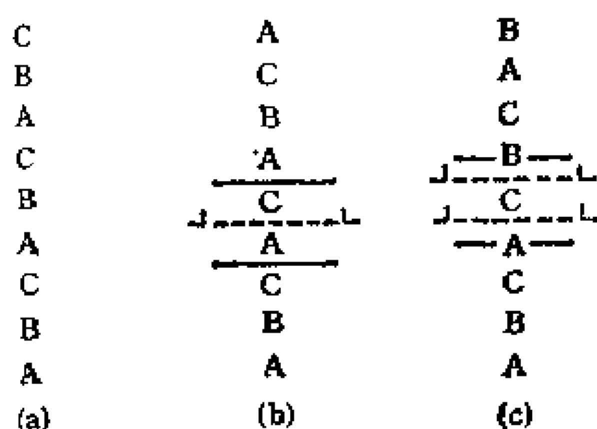


图 1.17 面心立方点阵中密排面的堆垛顺序[4]
(a) 正常排列 (b)内禀层错 (c) 外禀层错

$$\gamma = n\rho(\Delta G_{\circ} + E_{s}) + 2\sigma_{\circ}(n) \qquad (1.19)$$

其中ρ为最密面上单位面积的mol量，$\sigma_{\circ}(n)$为受层厚影响的单位面积界面能。Olson和Cohen[4]论证此式可用来估计共格界面的界面能$\sigma_{\circ}(n)$，方法如下，许多面心立方金属的内禀层错能已被可靠地测定；一些合金在面心立方点阵和密排六方点阵的热力学性质已知，从而可以算出$\Delta G_{\circ}$；应变能E_{s}在此情况下可忽略不计（占层错能的0.1%以下）；从而可以估计共格界面能。Fe-Cr(16—18%)Ni(12—14%)合金的共界面能约为0.010—0.015J/m²，界面熵约为1×10^{-5}J/(m²K)；Co-Ni合金的共格界面能约为0.005—0.01J/m²。

对于Fe-16%Cr-13%Ni和Fe-18%Cr-12%Ni合金中的由面心立方点阵到密排六方点阵ε相的马氏体转变，M_{s}点分别为178K(−95°C)和208K(−65°C)，$\Delta G_{\circ}$分别为−142和−126J/mol，$\sigma_{\circ}$分别为0.010和0.012J/m²，E_{s}在层错晶胚区很窄时较高，但扩展至足够宽时可以忽略不计，则得到形核的临界厚度（总层错能$\gamma=0$）为

$$n^{*} = \frac{2\sigma_{\circ}}{-\rho(\Delta G_{\circ} + E_{s})} \qquad (1.20)$$

对两种合金分别为7和10。由于每个位错产生2层密排六方点阵，故约需4或5个隔层存在的Shockley不全位错。

Olson-Cohen模型对马氏体形核能量的处理，正是基于上式。把马氏体晶胚的形成，看作已存在缺陷的自发形成层错，并计算缺陷和层错的总自由能变化。如果体积自由能项$(\Delta G_{\circ}+E_{s})$为负，即相变自由能差能克服弹性应变能，则总层错能γ可能随层厚n的增加而下降，达到负值。自然，随温度下降，γ也因$\Delta G_{\circ}$的绝对值增大而达到负值。这些情况示于图1.18中，其中$T_{\circ}^{coh}$是$\Delta G_{\circ}=E_{s}$的温度。对于Fe-30%Ni合金，在M_{s}点$\Delta G_{\circ}\approx1260$ J/mol，$E_{s}\approx500$J/mol，$\sigma_{\circ}\approx0.15$J/m²，则得到马氏体晶胚在$\gamma=0$的临界厚度$n^{*}$

$$n^{*} = 13.5 \qquad (1.21)$$

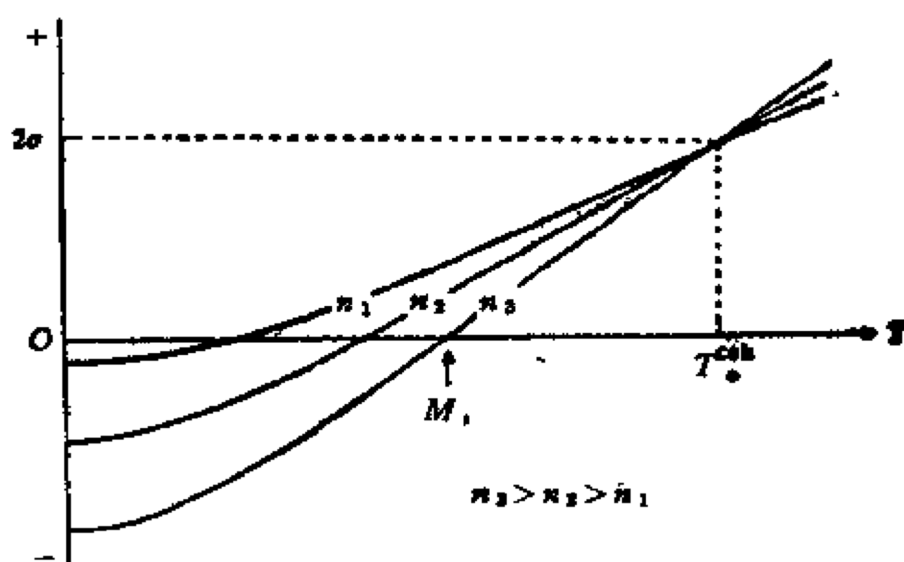


图 1.18 三种层错厚度的层错能对温度依赖关系示意图[4]

因为每3层最密面需要1个Shockley不全位错进行扩展，因而作为能量学的考虑，按Olson-Cohen模型，Fe-30%Ni 合金的马氏体形核，必需至少有5个Shockley不全位错间隔3层地存在于最密面上。这里所需位错数目与面心立方点阵转变为密排六方马氏体所需的位错数目相近。

4．对Olson-Cohen模型的评论

这一理论是目前较为流行的，有其成功处和不足处。可以这样说，Bain提出的马氏体由纯粹应变产生的机制[37]有可能解决点阵对应性问题，但未能解决两个相的点阵取向问题和惯习面问题，Bogers和Burgers刚球模型提出另一种点阵对应性，同时可解决点阵取向问题。Olson-Cohen模型在此基础上，详细地研究了产生Bogers-Burgers两次切变的位错来源，对形成这种晶胚的能量学有较详尽的理论分析和定理处理，克服了经典形核理论的最大难点——能垒过高。此外，对相界面的位错结构、共格关系的分析等，都有较深入的见解。但是，Olson-Cohen 模型尚有一些不足之处，有的甚至是关键性的或致命的，例如不能说明马氏体转变的根本特点之一——惯习关系。从前面的介绍可以看出，这一模型中马氏体晶胚是一片厚为10个原子层左右，横向扩展很大

（否则E_s会很高），沿密排面析出的薄片。换言之，这种晶胚的惯习面是密排面{1 1 1}，而实验测得的结果往往是{2 2 5}，{2 5 9}等无理指数面。如果说马氏体片内密排面到惯习面的变化是马氏体长大过程中出现的，从而不属于形核理论的范围，但从这模型提出到现在的近20年时间中，还没有任何研究者对这种惯习面变化的原因和机制提供任何线索。这一严峻的事实自然会引起怀疑，Olson-Cohen形核模型是否有可能并未正确反映形核过程？

其次，Olson-Cohen模型所要求的位错层错组态过于奇巧，在自然条件下出现的概率如此之低，以至于他们自己也称为是"几不可能的缺陷（improbable defect）"见文献[8]。此外，在讨论界面的位错结构时，他们曾论断若应变E是平面不变应变，则应变能最小，但马氏体晶胚所在的密排面，不可能是平面不变应变的不变面（惯习面），因此应变能最小的说法含有内在矛盾。还需要指出，在Olson-Cohen处理面心立方点阵到体心立方点阵时，层错区的原子排列并不是马氏体的排列，而是一种中间状态。其自由能也不是马氏相的自由能。不在不变面上的马氏体片周围的位错结构，无论如何复杂，也难于得到平面不变应变。但也必需指出，有一些实验研究[38, 39]是有利于Olson-Cohen模型的。

1.2.3 Ahlers模型，非均匀形核

这一模型[9]描述了马氏体转变中原子运动的途径。据笔者所知，这一模型并未流行或得到许多人的承认。这里的介绍，主要是指出改进形核模型的尝试，特别是对惯习面的解释。包括Ahlers模型在内的这方面的努力，取得的进展是有限的。

Ahlers模型是在参照了Wechsler，Lieberman和Read的马氏体转变的晶体学唯象理论[19, 20]后提出的。W-L-R理论认为马氏体转变是由于平面不变应变RSB的作用，其中B为变化点阵（由母相至马氏体）的Bain畸变，S为简单切变。R为刚性旋转（Ahlers在这里所列的操作顺序，与常见的如文献[19]中的RBS有不同，

但如在附录Ⅰ中所证明，当S为简单切变时，所作的矩阵乘法遵从变换律）。在Ahlers的模型中，Bain畸变被分解为两个切变和一个更小的Bain畸变的乘积，即$\mathbf{B}=\mathbf{S}_1\mathbf{S}_2\mathbf{B}_1$，其中$\mathbf{S}_1$为一个与S有相同切变系统的切变（相同的切变面和切变方向），而$\mathbf{S}_2$为一个以母相的低指数面为切变面的切变，位错很易在此切变面上运动，且此切变系统的切变模量很低。

把Ahlers模型与W-L-R理论对比即知，两者在晶体学关系上等价，因而给出相同的点阵取向关系和马氏体的惯习关系，这是与Olson-Cohen模型不同之处，也是把形核模型与晶体学唯象理论结合的尝试。按Ahlers的分解，马氏体转变的平面不变应变应为

$$\mathbf{D}=\mathbf{RSB}=\mathbf{RSS}_1\mathbf{S}_2\mathbf{B}_1=\mathbf{RS}_3\mathbf{S}_2\mathbf{B}_1 \tag{1.22}$$

其中$\mathbf{S}_3=\mathbf{SS}_1$。Ahlers认为这种把转变分解为两个切变$\mathbf{S}_3=\mathbf{SS}_1$和$\mathbf{S}_2$的优点，在讨论$\beta$黄铜和铜的形核和形状记忆效应时会变得十分明显。现以β黄铜由体心立方点阵变为面心立方点阵的热弹性马氏体转变为例。如图1.19所示，(a)中示出母相原子排列的透视图，在体心立方点阵中绘出一个面心四方晶胞，并在左上角取走一个原子，以显示三角形所表示的(0 1 1)。在(1 1 0)面上沿[$\bar{1}$ 1 0]切变，使四方晶胞畸变为一个菱形晶胞，而(0 1 1)面变成一个密排面。(a)中的原子A和D移至其新位置A′和D′。若把原子看作刚球，则这一切变会使[1 1 0]方向上的厚度下降。这种第一次切变后的中间结构示于图(b)中，此结构与马氏体相似处在于均由密排面堆成，不同处在于堆垛顺序不同。为了得到马氏体的堆垛顺序，三角形所示的面应相对于下层(含原子球A′，B，C)切变，切变方向可以是图(b)中的$-\mathbf{d}_2$方向，或是与之反平行方向。若按$-\mathbf{d}_2$方向切变，则得到图(c)所示马氏体结构。若按刚球模型，第二次切变会使切变面间的距离略增。所得到的面心立方点阵不具有马氏体的点阵常数，还需一个均匀的膨胀（或压缩）$\mathbf{B}_1$，调节点阵常数至正确数值，以完成此转变。因而Ahlers模型是先进行两次刚性切变，再作一次均

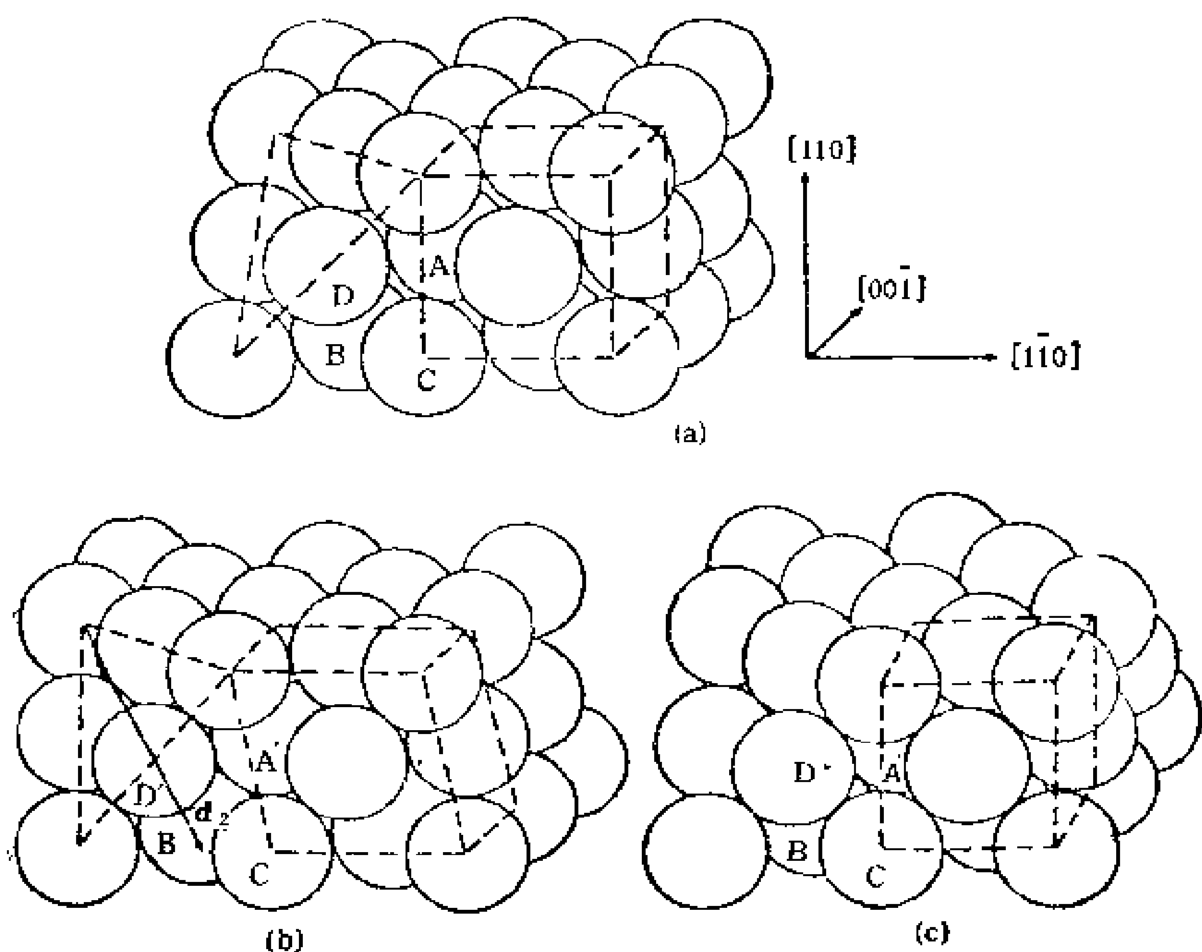


图 1.19 黄铜中马氏体转变的刚球模型[9]

(a) 体心立方点阵中取面心四方点阵晶胞

(b) 第一次切变后的中间结构，$-d_2$表示第二次切变方向

(c) 最后得到的面心立方点阵

匀的弹性膨胀，以代替W-L-R理论中的简单切变和Bain畸变。

对于惯习面为（259）的马氏体钢，由母相的面心立方奥氏体转变为体心四方马氏体。这种转变用Olson-Cohen模型（基于Bogers-Burgers两次切变）处理可得到正确的取向关系，但得不到惯习面。按Ahlers的处理，第一次切变是（111）面上$[\bar{1}2\bar{1}]$方向切变$\frac{2}{27}a$（a为面心立方奥氏体的点阵常数），切变顺序发生在相邻的（111）面上，如图1.20（a）所示。此时A′BC面具有的原子排列类似于稍有畸变的体心立方点阵的（112）面，如图1.20（b）所示。沿此种（112）进行第二次切变，可得到马氏体的

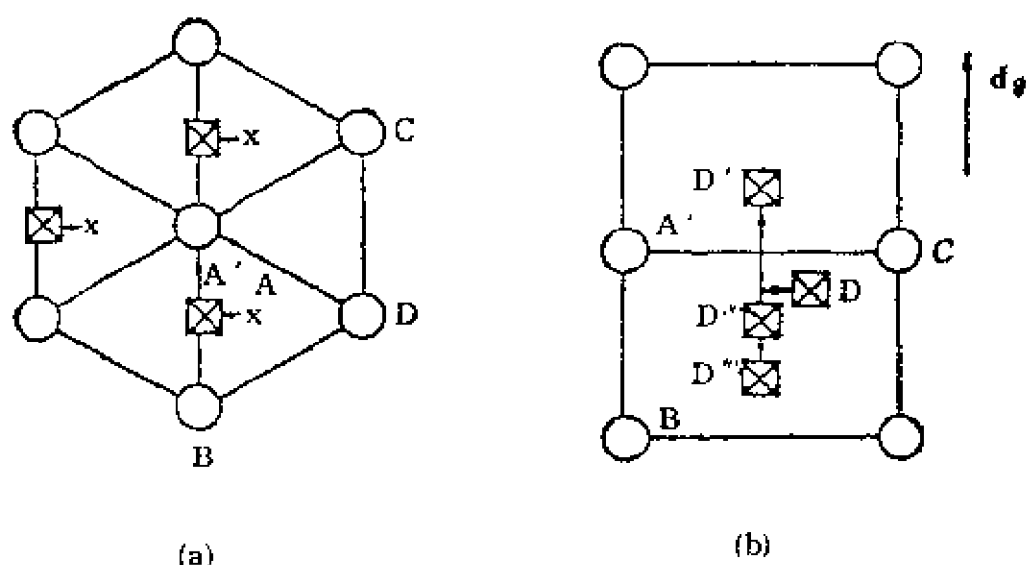


图 1.20 （259）马氏体在切变中的原子移动[9]
（a）（111）$_A$面上的第一次切变的原子移动
（b）第二切变面上的移动（x原子在○原子上层）

点阵，切变的方式可能使原子D移至D′，D″或D‴，其中移至D′和D‴的有相同结构，而至D″为相应的孪晶。图1.20示出这一转变过程的第一、二次切变系统以及所得到的惯习面。Ahlers模型是类比于W–L–R理论的，而后者在（2 5 9）马氏体上应用十分成功，故Ahlers模型自然也得到正确的惯习面。

Ahlers模型若作为晶体学理论，则是W–L–R理论的派生物，毫无新意。若作为对形状记忆效应的解释，可成一家之说。若作为马氏体形核理论，在得到惯析面上是一个进步，但却失去了Olson–Cohen理论在能量学上的优势。Ahlers完全没有讨论能量学，而这是形核理论的关键问题之一。尤其是Ahlers模型中包含了一个单纯的膨胀（或压缩）B_1。这会使能量学的问题变得更加尖锐。巧妙精心设计的位错组态及滑动，可以解决任何相变中的切变需要，却没有任何一种位错组态，能产生所需的纯粹弹性膨胀（压缩），这种弹性应变能所建立的能垒，可能是很高的。下面介绍另一个形核模型，情况恰好相反，能量学是上可能的，但晶体学的考虑是薄弱的。

1.2.4 Suezawa-Cook模型，非均匀形核

这种模型从弹性连续介质的角度，考虑在位错线组附近形成马氏体核的弹性应变能状况[10,40-42]。这种模型以Fe-29%Ni为例进行考虑和计算。如图1.21所示，在[1 $\bar{1}$ 0]方向有一位错线组，设为n根螺位错，有一扁球盘片形马氏体在附近形成，盘片法线与[0 0 1]垂直(可证明这种情况能量最低)，与[1 0 0]成φ角。形核的能量F_n分为两部分

$$F_n = F_c + F_e \tag{1.23}$$

其中F_c为相变自由能和界面能的变化

$$F_c = g_t n + S\sigma_0 \tag{1.24}$$

g_t是在温度t时每个原子相变的自由能差，n为原子数，S和σ_0分别为界面积和单位面积界面能。弹性能F_e也可写成

$$F_e = F_1 + F_b \tag{1.25}$$

其中F_d是晶胚与位错的交互作用能，F_b是晶胚本身在无位错情况

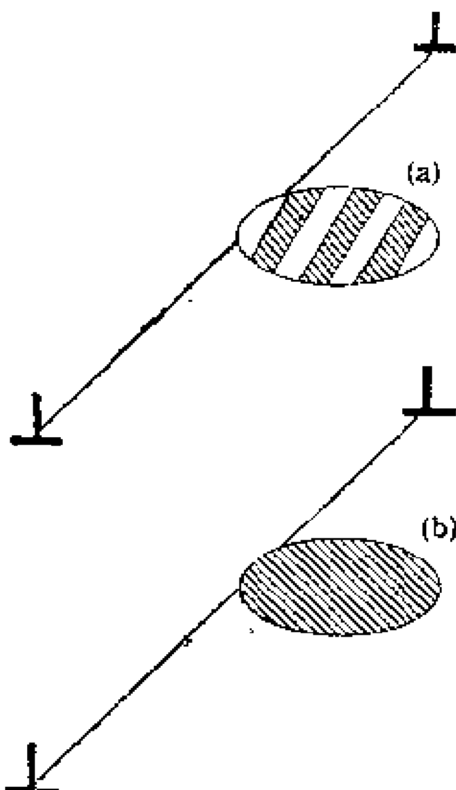


图 1.21 晶胚在位错处形成示意图[10]

(a) 分离的孪晶 (b) 连续分布的孪晶

下形成的自身能，计算得到

$$F_b = E_b n \qquad (1.26)$$

其中E_b取决于马氏体片的轴比（半厚与半径之比），随轴比上升而下降。而交互作用能

$$F_d = E_d n^{2/3} \qquad (1.27)$$

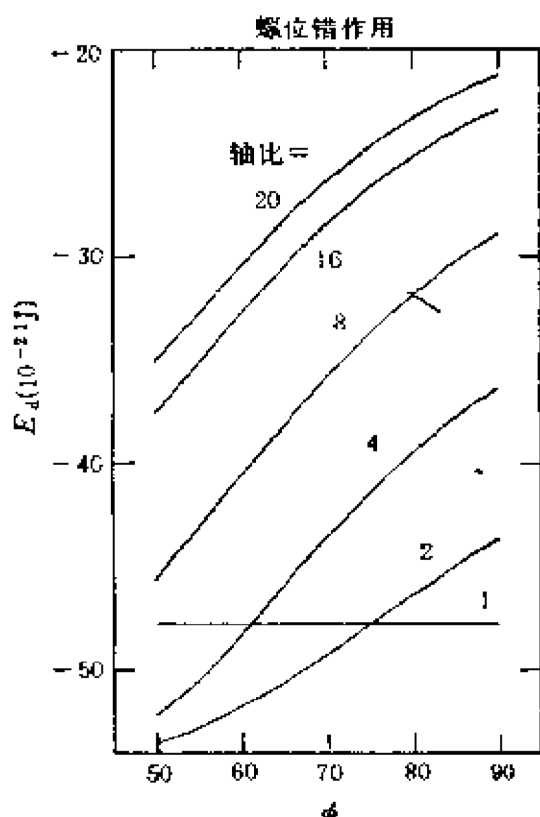


图 1.22 相互作用能的变化[10]

其中系数E_d为一负值，且取决于轴比和角度φ，如图1.22所示。由于$n^{2/3}$一般是正比于面积，因而F_d好似一个负的界面能。至于E_d为负值，是很好理解的，即马氏体晶胚的出现，可能降低位错的弹性能。在这里值得注意的一点是对于E_d最小值的φ角，并不对应于Fe-29% Ni合金的惯习面。换言之，这一模型也未解决惯习关系问题。

在计入相变自由能以后，计算得到250K在螺位错上晶胚的形核途径如图1.23所示。可以看出，能量最低的形核途径是轴比不断变化的。临界核的半径约为1000原子，轴比约20，能垒约为50KT。在界面能估计为0.2J/m²时，螺位错的个数为10。由于此时有形核能垒，马氏体转变可能出现恒温转变的性质，在更低的温度下，形核能垒可能消失，而出现非热（即变温）马氏体(athermal martensite)。

这个模型给予的启示是，如果不考虑取向关系和惯习关系等晶体学因素，完全从弹性力学出发，找到一种能够形成马氏体核、又使弹性能下降的位错组态，常常是可能的，但却是难于被承认的。反过来，只解决晶体学关系而不解决能量学的形核模型也是站不住脚的。迄今的形核理论表明，晶体学关系（尤其是惯

习面）与能量学关系（形核能垒低）的协调，可能是形核理论的关键。

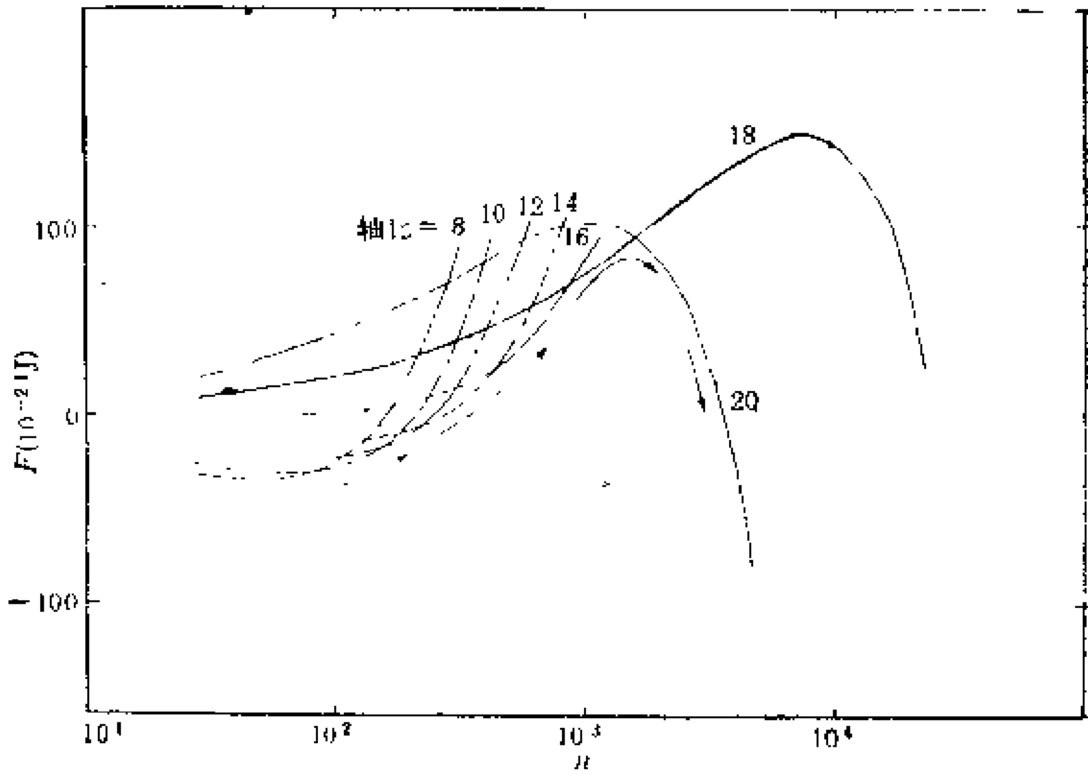


图 1.23 螺位错上晶胚的长大途径[10]
Fe-29%Ni，250K，Nb=1，$\gamma=0.023J/m^2$

1.3 软模形核理论

1.3.1 软模的概念

软模是软模声子（soft mode phonon）的简称，指晶体点阵中，因原子热振动形成格波中那些振幅大、频率低的声波振动模式。把这种软声模与马氏体转变的形核联系起来，是与材料科学中经典形核理论完全不同的思考。声模与晶体的弹性常数密切相关，Zener[43]或许是第一个把马氏体转变和固体的弹性性质联系起来的人。他注意到由体心立方点阵到面心立方点阵的马氏体转变中，其中多数材料系统在(1 1 0)面上[1 1 0]方向切变的弹性

阻力，用$\frac{1}{2}(C_{11}-C_{12})$来量度，比其他的弹性常数要低得多，且这种切变的振幅如果足够大，则可使体心立方点阵变为面心立方点阵。一些研究者发展了这种概念[44, 45]，但仍未解答马氏体转变如何发生及为什么发生的问题。

对于Ti，Zr和Hf合金中由β到ω的非热转变，de Fontaine[46]建议了一个非常有趣的假说，认为这种转变的发生，可能是因为点阵相对于一个特殊的，中心在$\frac{2}{3}<1\ 1\ 1>$的纵波声子群失去稳定性。这种想法对Clapp[15]发展其马氏体形核理论有重要影响。

作为二级相变中的软模（如$SrTiO_3$）已被普遍接受[47]。对马氏体转变，在M_s附近的温度范围内，点阵软化和软模声子均有不少实验证实[42-53]。有人认为由于软模声子被“冻结”，从而得到马氏体的核心[13, 14]，这种理论建议了由均匀分布的软模得到马氏体的均匀形核。但正如最新的研究[54]指出，由于众多的小粒实验[55, 56]和γ铁脱溶实验显示[57]，马氏体形核具有明显的非均匀形核性质，因而不是均匀形核的理论所能解释的。此外，软模实验显示出中心高峰，也与均匀软模机理的假设不符。

1.3.2 Clapp的软模形核模型

Clapp在1973年（Olson-Cohen的缺陷形核理论发表于1976年）提出了一个局域化的软模理论，处理马氏体转变[15]。他在论文中明确提出，只想解释马氏体转变的起始形核问题，而不处理核心长大的问题，也暂不涉及惯习面及其他晶体学特征，如马氏体转变引起的浮凸等。由此可见，这一模型几乎只处理能量学问题。Clapp认为，马氏体转变是被应变导至的弹性不稳定性所触发，这种不稳定性存在于母相点阵的一些特殊区域；弹性自由能中所含的非谐和项会大大降低原来估计的形核高能垒；上述特殊区域中的点阵振动（声子）在形核过程中起重要作用。

一个可相变系统的单位体积自由能可写作其应变的函数

$$F=F_{o}+\frac{1}{2!}\sum_{IJ} C_{IJ}\eta_I\eta_J+\frac{1}{3!}\sum_{IJK}C_{IJK}\eta_I\eta_J\eta_K+\cdots \quad (1.28)$$

圆点表未写出的更高次的项。此处所用为Voigt概念 (I, J, $K=1,\cdots,6$)的Brugger弹性常数，而η_I是Lagrange应变参数[58]。F_o是未应变时的自由能。对于立方系晶体，由于一些系数为零，另有一些对称，故可写出明显的自由能密度表示式为

$$\begin{aligned}F=F_{o}&+\frac{1}{2}C_{11}(\eta_1^2+\eta_2^2+\eta_3^2)+C_{12}(\eta_1\eta_2+\eta_2\eta_3+\eta_3\eta_1)\\&+\frac{1}{2}C_{44}(\eta_4^2+\eta_5^2+\eta_6^2)+\frac{1}{6}C_{111}(\eta_1^3+\eta_2^3+\eta_3^3)\\&+\frac{1}{2}C_{112}(\eta_1^2\eta_2+\eta_2^2\eta_1+\eta_1^2\eta_3+\eta_3^2\eta_1+\eta_2^2\eta_3+\eta_3^2\eta_2)\\&+C_{123}\eta_1\eta_2\eta_3+\frac{1}{2}C_{144}(\eta_1\eta_4^2+\eta_2\eta_5^2+\eta_3\eta_6^2)\\&+\frac{1}{2}C_{166}(\eta_1\eta_6^2+\eta_1\eta_5^2+\eta_2\eta_4^2+\eta_2\eta_6^2+\eta_3\eta_4^2+\eta_3\eta_5^2)\\&+C_{456}\eta_4\eta_5\eta_6\end{aligned} \quad (1.29)$$

式中写出了第三级应变项，因为这是讨论点阵潜在的不稳定性所需的最低级的项。如果这类不稳定性发生在相对而言较低的应变值（如百分之几），则高于第三级的项是可以忽略不计的。

Born[59]和Milstein[60]提出了立方点阵晶体在均匀应变下的稳定性判据。Clapp应用这些判据在6维的应变空间建立一个不稳定性面，称为strain spinodal（应变调幅分解面），以类比于固溶体中的调幅分解（chemical spinodal）。在外加应变作用下，点阵应变可能达到不稳定面，从而自动分解成高能区与低能区，以降低系统自由能。

考查系统自由能对应变的二阶导数构成的6行6列矩阵

$$\frac{\partial^2 F(\eta)}{\partial\eta_I \partial\eta_J} = F_{IJ}(\eta) \quad I,J=1,\cdots,6 \qquad (1.30)$$

如果这对称矩阵的6个本征值全为正，则按Born的判据，这点阵对任何微小的均匀应变是稳定的。但随应变增加，本征值变化，其中1个或几个本征值可能变为零，此时点阵对一些特定模式的应变呈现不稳定，而这种模式应变的进一步增大并不引起系统自由能上升。这种不稳定的应变模式，是Lagrange应变的线性组合，并且是变为零的本征值的本征矢。

因为任何均匀形变产生的点阵畸变可与1个或几个长波声子所产生的点阵畸变相联系，因而点阵也存在一种动力学不稳定性，即长波声子群的频率可达到零，而其振幅不再有能量限制。这种应变引起的"软声子模式"在形核过程中起重要作用。

Clapp[15]用电脑计算了稳定性矩阵$F_{IJ}(\eta)$的本征值与应变的函数关系，并求得在应变调幅分解时的最小能量点，所得的结果示于表1.2。其中Na和Li在极低温度下确有马氏体转变（体心立方点阵变成面心立方加密排六方的混合点阵），但所用的第三级弹性常数为理论估计值[58]，而不是实验测定值。β黄铜为Cu-50%Zn（原子），所用第三级弹性常数为测定值，但这一成分合金并无马氏体转变，只有37-43%Zn（原子）的合金中有马氏体转变。

表 1.2 最小能量的应变调幅分解点

金　属	η_1, η_2	η_3	η_4, η_5, η_6	体积变化 $\Delta V/V$	能量 E(K)	本征矢
Li	−0.014	+0.030	0.000	+0.002	1.58	≈$\bar{4}\bar{4}9$
Na	−0.015	+0.032	0.000	+0.002	1.83	≈$\bar{4}\bar{4}9$
β-CuZn	−0.020	+0.044	0.000	+0.004	16.7	≈$\bar{3}\bar{3}7$

图1.24示出Li的稳定矩阵系数$F_{IJ}(\eta)$在应变空间沿一个方向

变化的值，此方向是$\eta_1=-\tau/2$；$\eta_2=-\tau/2$；$\eta_3=\tau$；$\eta_4=\eta_5=\eta_6=0$，这非常接近于一个无体积应变的纯粹Bain畸变。在此情况下，Born的稳定性判据退化为[60]

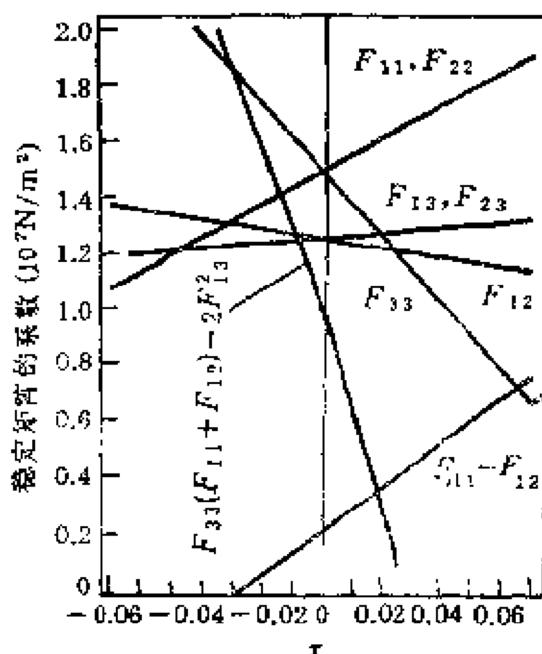


图 1.24 镍的稳定矩阵的系数随应变的变化[15]

$$
\left.\begin{aligned}
&(a)\ F_{12}>0\\
&(b)\ F_{13}>0\\
&(c)\ F_{11}-F_{12}>0\\
&(d)\ F_{33}(F_{11}+F_{12})\\
&\qquad -2F_{13}^2>0
\end{aligned}\right\}\quad(1.31)
$$

可以看出，在图1.24中条件(d)在$\tau\approx+0.03$处，及(c)在$\tau\approx-0.03$处遭到破坏，因而这些点是应变空间中沿这一特殊方向上的应变调幅分解点。

由(1.25)式得

$$
F-F_0=-\frac{3}{4}[C_{11}-C_{12}]\tau^2+\frac{1}{4}\left[\frac{3C_{112}}{2}-C_{123}-\frac{C_{111}}{2}\right]\tau^3 \tag{1.32}
$$

对Bain应变模式的"恢复力常数"K_B被定义为

$$
K_B=\frac{\partial^2 F}{\partial\tau^2}=-\frac{3}{2}[C_{11}-C_{12}]+\frac{3}{2}\left[\frac{3C_{112}}{2}-C_{123}-\frac{C_{111}}{2}\right]\tau \tag{1.33}
$$

图1.25示出两种应变模式下的应变自由能和恢复力常数可以看出，恢复力常数在$\tau\approx0.03$时降为零。另一个恢复力常数是(110)$[\bar{1}\ 1\ 0]$切变模式，即$\Delta\eta_1=+\varepsilon/2$；$\Delta\eta_2=-\varepsilon/2$；$\Delta\eta_{3,4,5,6}=0$，被定义为

$$
K_S=\frac{F_{11}-F_{12}}{2} \tag{1.34}
$$

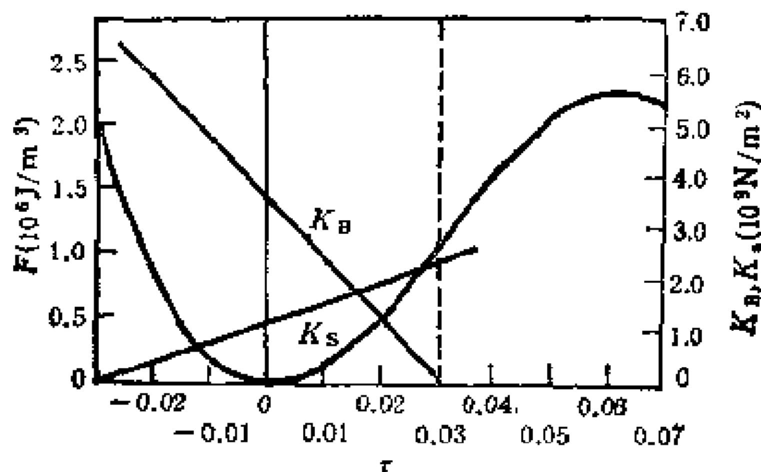


图 1.25　锂的应变自由能和恢复力常数与应变的关系[16]

可以看出，K_s在$\tau \approx 0.03$处变为零，但所对应的自由能比 K_B为零处的自由能要高得多。图中在失稳处自由能未呈现可见的拐点，可能需在三维图形上才能显示出来。

表1.2所示的结果有几点值得注意。首先是达到点阵失稳的应变很低，只有百分之几，因此在计算自由能时略去第四级及更高的项看来是可行的。其次，引起失稳的应变非常接近纯粹的Bain畸变($\eta_{1,2} = -\eta_3/2$，$\eta_{4,5,6} = 0$)，而这正是使体心立方点阵连续地形变为面心立方点所需的。第三，达到点阵失稳的每原子应变能只有几度Kelvin（约相当于几十J/mol）。最后，达到点阵

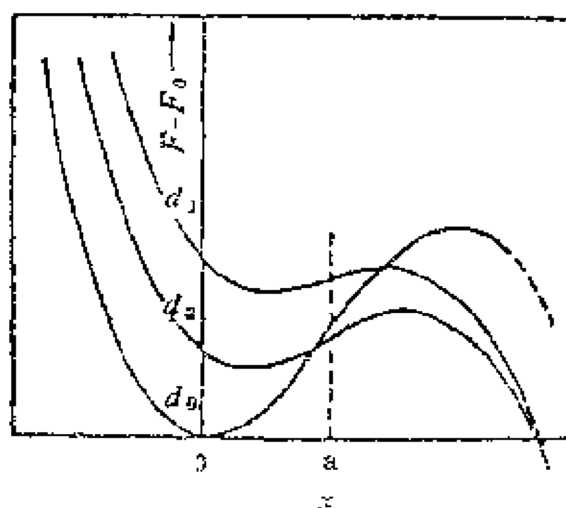


图 1.26　在距表面不同距离处的应变自由能的变化示意图[15]
$d_1 < d_2 < d_3 < d_\infty$

失稳后发生调幅分解，得到的应变仍然接近于Bain畸变，即一部分失稳点阵因分解为高应变区而更近于面心立方点阵，而另一部分分解为低能区而接近于体心立方点阵。

以上一直考虑外因施加的应变，而在实际晶体中，大量点缺陷、线缺陷和面缺陷附近区域就存在应变。各种缺陷的应变场不同，促进形核的潜力也不相同。理论和实验均表明[61,62]，在平面状的自由表面附近，面间距通常会增大。对于垂直于立方轴的表面附近，可能有5-10原子层厚的面积很大的区域接近于应变调幅分解面。对于非共格晶界附近，也有类似的情况。在这类表面的附近，在应空间中自由能沿一个方向变化为

$$F = F_0 + A(d) + B(d)\tau + C\tau^2 + D\tau^3 + \cdots \qquad (1.35)$$

其中d为距表面的深度。$A(d)$表单个原子在表界附近的键能变化，$B(d)\tau$表因点阵常数在表面附近增大所引起的变化。C，D主要与原子之间相互作用有关而独立于d。这种自由能密度与d的关系示意于图1.26中。可以看出，应变的调幅分解点$\tau=a$不因d而变，可能因为C，D的作用。自由能的极小值随d减小而移向调幅点，可能是点阵常数变大的结果。自由能曲线的极小值处的曲率，也随d减小而减小，这可能导致在线性应变参数τ下的较大振幅、较小频率的涨落。这类表面附近的应变区，可能就是马氏体的晶胚。此外，其他缺陷，如位错、层错等，也有类似的、但程度较小的促进非均匀形核的作用。

在含有接近调幅点的足够大应变的区域，点阵振动的行为不同于在完整晶体区域。在应变区域的点阵振动有大得多的振幅和长得多的振动周期。这是因为决定这类点阵振动恢复力的弹性常数组合在近调幅点时为零。若此动力应变场与这种点阵反常振动群联合，使此区域更接近应变调幅点，则一种合作类型的相变就出现了，即在相变方向上的点阵动力涨落降低了新相进一步长大的阻力，从而发生一种越滚越大的“雪球”效应。这可看作是马氏体形核的粗略的物理图象。

1.3.3 评论

Clapp的局域化软模理论，为解决马氏体形核的能量学，提供了一条崭新的途径，尤其是在一些有色合金系统中，发现了在M_s附近温度区域内弹性常数的反常变化，即随温度下降弹性常数下降，这十分有利于软模理论的模型。但在Fe-C，Fe-Ni等合金中，至今未发现这种反常变化。此外，软模模型对解决马氏体形核的能量学虽有很大潜力，但却对晶体学特征没有明确的规定或说明，难于构成一幅马氏体形核的完整图象。必须说明，软模模型与惯习面、取向关系等晶体学规律并不排斥，并在其框架内留有妥善安置这些规律的余地。但是，20年来，在这些余地中却无什么重要建树。由于定量地说明此理论的物理学极为复杂，因而与Olson-Cohen模型的“常规物理学中几不可能的缺陷”相对应，Clapp的局域化软模模型被称为“几不可能的物理学中的常规缺陷”[8]。在目前没有第三种选择的情况下，一般倾向于认为：在Fe-C，Fe-Ni等非热弹性马氏体转变的形核中，Olson-Cohen的经典缺陷理论可能起主要作用，在Cu-Zn，Au-Cd等热弹性马氏体转变中，Clapp的局域软模理论可能扮演重要角色，最近的研究[54]代表了这种典型的观点。作为介绍目前流行的马氏体形核理论的结束，可以这样总结：两种形核理论模型各有长处，各有一定的理论和实验依据，但又各有弱点，两者都是不能令人完全满意的。

1.4 D形核理论

1.4.1 概述

关于马氏体形核理论，已有不少综合性评论，如文献[63—67]。鉴于目前流行的两种马氏体形核理论均不能令人满意，笔者在此建议一个新的形核模型[68-70]，在常规物理学和常规缺陷的

基础上，能把晶体学与能量学自然地结合，使有关的困难获得统一的解决．具体地说，能够使马氏体形核是低能垒甚至无能垒的过程，晶胚具有正确的取向关系，沿正确的惯习面析出，界面有共格关系，转变应变以切应变为主，转变有非均匀形核的特征，等等．总之，所建议的理论模型能满足前言后所列的马氏体转变的全部特征，这个模型与马氏体转变的晶体学唯象理论密切相关，其平面不变应变**D＝RBS**起核心控制作用．因而可以称为D形核理论．此理论还有一个附带的、但重要性不下于对形核解释的作用，为成功地流行了40年之久的马氏体转变的晶体学唯象理论提供理论基础．

如果深入地分析经典形核理论，寻找何以形核能垒如此之高的原因，则会发现，除一些常数的选用（如界面能）有影响外，根本原因是两条，一是马氏体与母相间有明锐的界面，因而有相当高的界面能，一是弹性应变比较地集中分布于马氏体核周围，因而有相当高的弹性能．

分析一下第一点，若估计界面能在0.02－0.20J/m^{2}的范围，界面厚5原子层，约为1nm，则此界面能大约相当于10^3-10^4J/mol，这是一个相当高的能量．自然估计是粗略的．若界面能由10倍甚至100倍于原厚度的层来分担，则相应的能量仅为几百个J/mol，是一般合金马氏体转变范围内的热运动可以克服的了．第二点是弹性能，马氏体转变由于点阵变化、形状变化及保持共格，要发生很大的切变及相应的正应变．对于嵌于母相中的一定形状和大小的马氏体片，这种切变和正应变可归结为界面处的位移场，这个位移场的梯度与弹性能密切相关，梯度变陡（应变“浓缩”），则弹性应变能增高，若梯度变平缓（应变的“稀释”），则弹性应变能按平方规律下降．即在相同的边界位移条件下，若能使应变分布在较大范围内而稀释，则弹性应变能是可以大大降低的．

基于上面的考虑，新的形核模型有两个根本特点：（1）马氏体和母相之间的联结处，不是一个几原子层厚的明锐的界面，而是一个几百原子层厚的低应变过渡区；（2）参与马氏体形核

的，是一个较大的区域，例如涉及10^6原子，弹性位移梯度的分布比较平缓，因而弹性应变能较低。按照这种设想，形核的界面能与弹性应变能合并在一起，不能区分。整个形核过程，受平面不变应变的控制，晶体学唯象理论中的平面不变应变D=RBS起着决定性的控制作用。平面不变应变在马氏体形核过程中起如此重要的作用，是因为这种应变有一个独特的性质，可以稀释，从而在能量学的竞争中，独占鳌头，成为决定性因素，并决定了晶体学的特点，如取向关系、惯习关系，等等。因而首先要从平面不变应变说起。

1.4.2 平面不变应变

一物体受内、外作用发生形变，体内各点发生位移**u**，分量u_1，u_2，u_3均为坐标的函数。形变前，一点P（x，y，z）至相邻点Q（$x+\Delta x$，$y+\Delta y$，$z+\Delta z$）的矢量为**r**，形变后P移至$\bar{\mathrm{P}}$，Q至$\bar{\mathrm{Q}}$，差矢变为$\bar{\mathbf{r}}$，则

$$\bar{\mathbf{r}}=\mathbf{E}\mathbf{r} \tag{1.36}$$

其中

$$\mathbf{r}=\begin{bmatrix}\Delta x\\ \Delta y\\ \Delta z\end{bmatrix} \tag{1.37}$$

$$\mathbf{E}=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial u_1}{\partial x} & \dfrac{\partial u_1}{\partial y} & \dfrac{\partial u_1}{\partial z}\\[2ex] \dfrac{\partial u_2}{\partial x} & \dfrac{\partial u_2}{\partial y} & \dfrac{\partial u_2}{\partial z}\\[2ex] \dfrac{\partial u_3}{\partial x} & \dfrac{\partial u_3}{\partial y} & \dfrac{\partial u_3}{\partial z}\end{bmatrix} \tag{1.38}$$

本书将用黑体正体大写字母表3维空间的2阶张量，也可表为3行3列矩阵，如**E**；大写斜体字母带下标表其分量，如E_{ij}；用黑体小写正体字母表矢量，如**r**；小写斜体字母带下标表分量，如r_i；空间线段矢量表为列矩阵，平面法线矢量（以下简称法矢）表为行矩阵。**E**的转置矩阵表为**E**′，**E**的逆矩阵表为$\mathbf{E}^{-1}$。上式中的**E**称

为位移梯度张量或相对位移张量，可以分解为一个对称张量和一个反称张量之和。

$$\mathbf{E}=\mathbf{E}_0+\mathbf{R} \tag{1.39}$$

$$\mathbf{E}_0=\frac{1}{2}(\mathbf{E}+\mathbf{E}') \tag{1.40}$$

$$\mathbf{R}=\frac{1}{2}(\mathbf{E}-\mathbf{E}') \tag{1.41}$$

此处的$\mathbf{E}_0$称为应变张量，$\mathbf{R}$称为旋转张量。很明显，应变张量$\mathbf{E}_0$为

$$\begin{bmatrix} \dfrac{\partial u_1}{\partial x} & \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\partial u_1}{\partial y}+\dfrac{\partial u_2}{\partial x}\right) & \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\partial u_1}{\partial z}+\dfrac{\partial u_3}{\partial x}\right) \\ \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\partial u_2}{\partial x}+\dfrac{\partial u_3}{\partial y}\right) & \dfrac{\partial u_2}{\partial y} & \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\partial u_2}{\partial z}+\dfrac{\partial u_3}{\partial y}\right) \\ \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\partial u_1}{\partial z}+\dfrac{\partial u_3}{\partial x}\right) & \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\partial u_3}{\partial y}+\dfrac{\partial u_2}{\partial z}\right) & \dfrac{\partial u_3}{\partial z} \end{bmatrix} \tag{1.42}$$

必然是对称张量，有6个独立分量。反称张量$\mathbf{R}$代表旋转，只有3个独立分量。特别需要指出的是在本书中，以及讨论同一内容的其他文献中，往往把按严格术语应该被称为“位移梯度张量”的$\mathbf{E}$称为“应变（strain）”或“应变张量(strain tensor)”（因而是不对称张量，含9个独立分量），而把力学上严格定义的、作为对称张量的应变张量$\mathbf{E}_0$称为“纯粹”应变张量（pure strain tensor）。因而，本书的平面不变应变（invariant plane strain）是含有纯粹应变和旋转在内的、不对称的张量——一种特殊的位移梯度张量。

一物体经均匀应变后，若能保持一个平面不转动不畸变（可以平动），则称此应变为平面不变应变$\mathbf{D}$，完全由不变面法线矢量$\mathbf{p}'$和不变面的位移矢量$\mathbf{d}$决定。

$$\mathbf{D}=\mathbf{I}+\mathbf{d}\mathbf{p}' \tag{1.43}$$

其中$\mathbf{I}$为单位矩阵。可见平面不变应变实际上只有6个独立分量。平面不变应变不但可以表为对称部分(纯粹应变)和反称部分

（刚性旋转）之和，而且常可分解为旋转**R**，正应变**B**，和简单切变**S**之积

$$\mathbf{D}=\mathbf{RBS} \tag{1.44}$$

（1.43）和（1.44）是两个基本公式，含有极为丰富的物理内容，将在以后详加分析。平面不变应变的特性可表为：若一线矢**x**在不变面**p**′上，即**p**′**x**＝0，则

$$\mathbf{Dx}=\mathbf{x} \tag{1.45}$$

若一法矢为**n**′的平面包含位移矢量**d**，即**n**′**d**＝0，则

$$\mathbf{n}'\mathbf{D}^{-1}=\mathbf{n}' \tag{1.46}$$

有关平面不变应变的叙述，见附录Ⅱ。

现在来说明一个平面不变应变的一个基本特性，这是对马氏体的形核和长大起控制作用的图象：在保持边界位移不变的情况下，平面不变应变可以“稀释”，这种稀释的程度是无限的。图1.27示出一块长为无限，宽为W，厚为d_0的板，若在OO'施加切向位移**d**，而在长为l处保持不变形，则在$OO'LL'$范围内的应变$\mathbf{d}/l$为

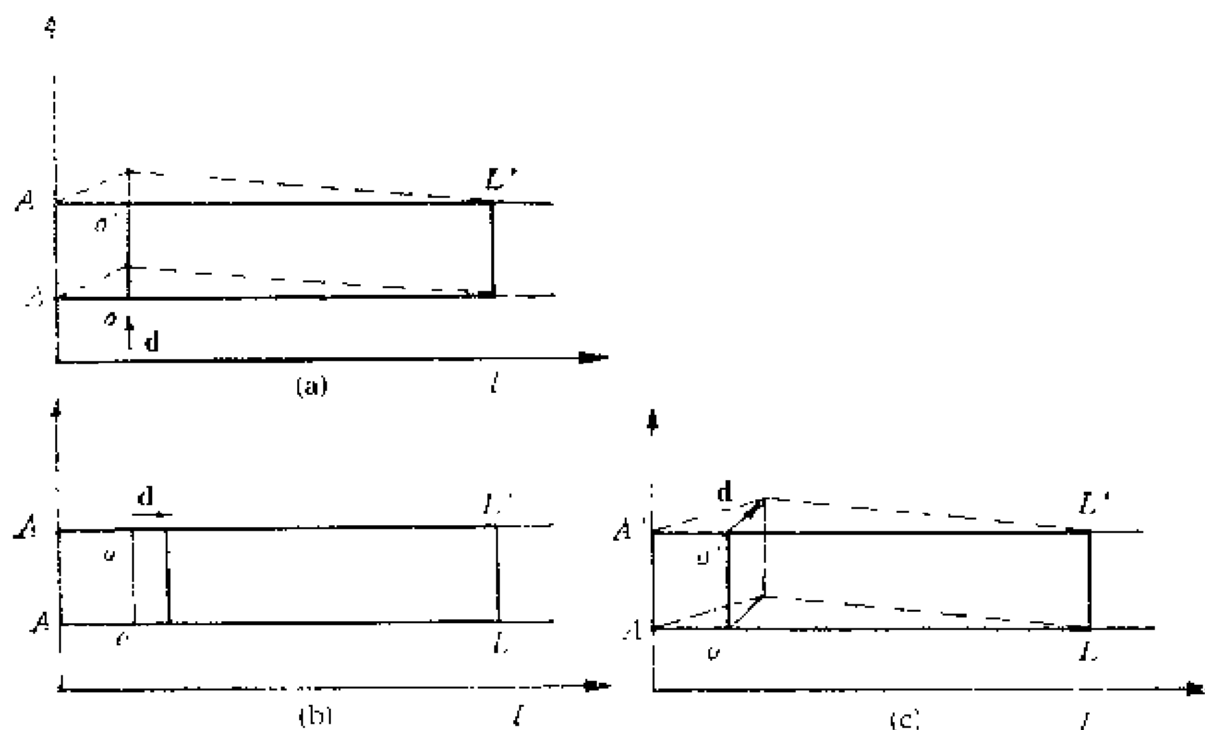


图 1.27 应变的“稀释”

(a) 简单切变 (b) 单轴拉伸 (c) 平面不变应变

一简单切应变，是平面不变应变的一种，不变面为与OO'平行的面。若选用较长的l距离，则此应变下降，即稀释。现在改切位移d为法向位移d，则变成简单的单轴拉伸应变，仍为一种平面不变应变，不变面仍为与OO'平行的面，应变大小仍为d/l，且随l选的加长而稀释。以上两种情况的稀释都是无限的。

在一般的情况下，位移矢量d与不变面p′（即OO'面）斜交，此时仍为为平面不变应变，可写为$\mathbf{D}=\mathbf{I}+\mathbf{dp}$，表$AA'OO'$区内的平面不变应变，而$OO'LL'$区域内的平面不变应变$\Delta$则比D小$l$倍，$\Delta$可以称为与D对应的稀释应变张量(diluted strain tensor)或约化应变张量(reduced strain tensor)。由此可见，在保持边界处（OO'）位移矢量d不变的条件下，$OO'LL'$区的平面不变应变Δ可以随l加大而稀释，这种稀释是无限的。

作为一个平面不变应变的约化应变Δ，具有与D相同的不变面p′（即与OO'平行的面），其位移矢量为δ，则

$$\Delta=\mathbf{I}+\delta\mathbf{p}' \tag{1.47}$$

其中δ为位移$=d/l$，也随l增大而减小。如果δ保持其方向不变，但随位置而改变其大小，则Δ不是均匀分布，而随位置而变，则

$$\mathbf{d}=\int\delta(r)\,dr \tag{1.48}$$

及

$$\mathbf{D}=\int\Delta(r)\,dr \tag{1.49}$$

其中r表在p′方向上的以法矢长度量度的距离，无量纲，可称为约化距离。

上面说明平面不变应变可以无限稀释，下面说明不是平面不变应变则不能无限稀释或完全不能稀释。不作严格的证明，只举一个完全不能稀释的三向正应变为例。图1.28示出一块无限大物体。若把半径为r的圆周扩张，使变为半径R的圆周，即产生一个径向的边界位移条件。保持半径为l处球面的位移为零。若此扩张是均匀的，而又保持材料连续，则圆周上的点产生三向正应变。很易看出，这种正应变的大小，是不能通过l的加大而稀释的，以

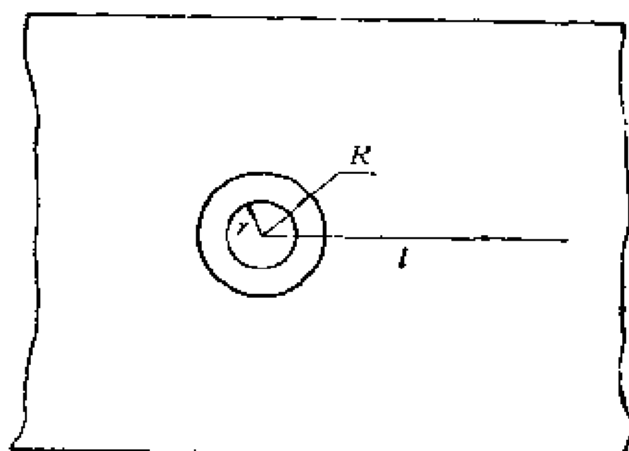


图 1.28 不能稀释的应变的例子——三向正应变

圆周切线方向的应变为例。

$$\varepsilon_\theta = \frac{\pi R^2 - \pi r^2}{\pi r^2} = \left(\frac{R^2}{r^2} - 1\right) \tag{1.50}$$

是一个常数，与l无关。径向的应变的情况也类似，这里只假定了应变沿圆周均匀分布及材料保持连续的条件。这种应变不能稀释的情况也可以用弹性力学作更严格的证明。

1.4.3 马氏体晶胚的弹性应变能

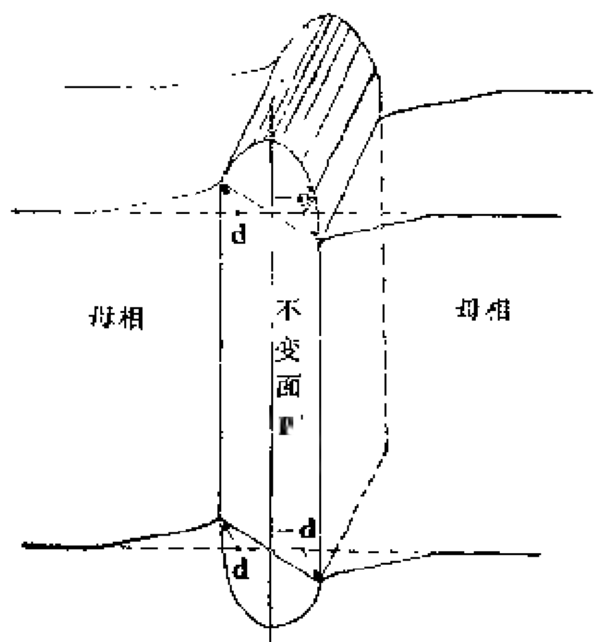


图 1.29 不变面F上出现的马氏体晶胚及其边界上的位移d和−d

现在，在马氏体转变的晶体学唯象理论和平面不变应变可以稀释这两基点上，对一个马氏体晶胚引起的弹性应变作一个估计。首先，按照唯象理论的要求，晶胚在平面不变应变的不变面上出现，成圆片状，设直径约为100原子间距，厚为2原子间距，如图1.29所示。此马氏体晶胚由平面不变应变D＝RBS形成，其中S为不改变点阵的简单切变，是不均

匀分布的，如滑移或孪生；B为（广义的）Bain畸变，是使点阵由母相变为马氏体的均匀应变；R是一刚性旋转，是为了保持整个应变为平面不变应变所必须的。这一平面不变应变在马氏体片的两侧面保持位移d，大小相等、方向相反，并以切位移为主要部分。这一对位移是保持马氏体结构出现在母相结构中所必须的，也正是平面不变应变中的位移矢量d。平面不变应变为 $D=I+dp'$。其中 p' 为不变面的法矢，并以晶面间距为单位长度。这种母相结构、马氏体结构和平面不变应变的关系，示于图1.30中。图(a)中示出两种相的结构示意图，关键之点是其中竖实线表不变面在纸面的投影。有两点需要注意，一是既为不变面，则在母相与在马氏体中应相同，最多只有一个相对平动，而没有转动与畸变。另一点是不变面即惯习面，通常不是有理晶面，因而实际上应由许多曲折的低指数小晶面构成，在宏观看来才是不变面，因而，图1.30(a)中竖实线，只是这些宏观平均不变面的示意，至于虚线，只是为了表出两种结构的不同。图(b)表两相接触，

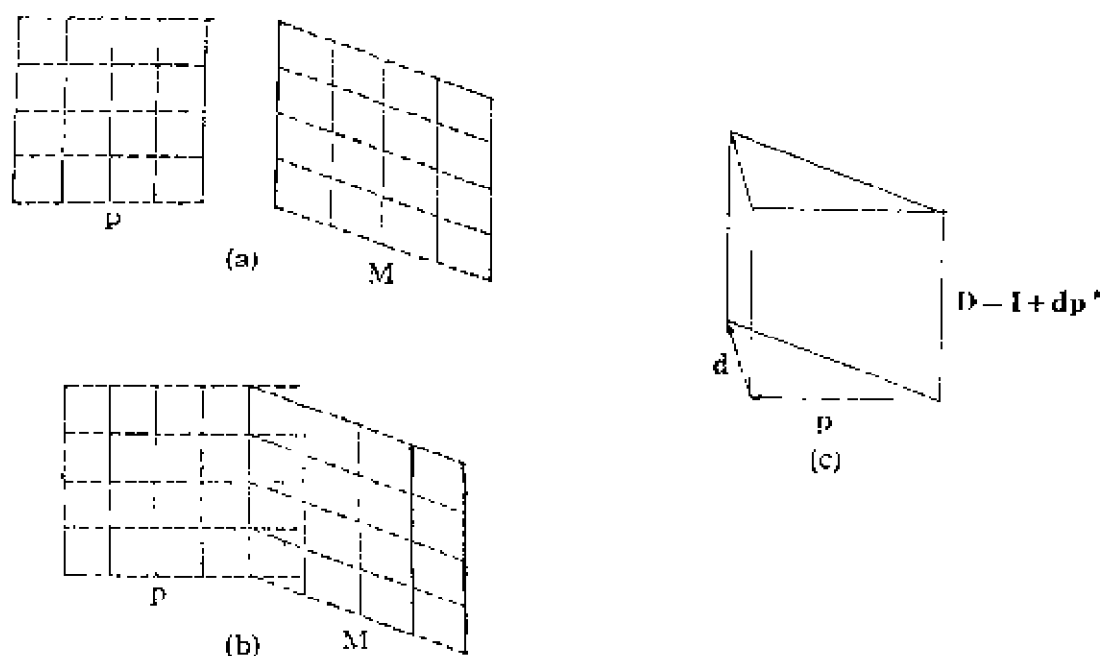


图 1.30 母相、马氏体和平面不变应变（p，母相；M，马氏体）

(a) 母相和马氏体的结构，实线表不变面的投影

(b) 两相的联接

(c) 马氏体转变的平面不变应变

并由母相变成马氏体的情况。图（c）则示出这个转变相应的平面不变应变。

按照一般形核理论的通常作法，设马氏体晶胚的弹性应变均匀地分布在一个半径为r的球形体积内。与过去的模型不同之处在于，这里所建议的马氏体形核模型中，马氏体和母相间没有明晰的界面，而是一个逐渐变化（指平行的不变面族的位移）的过渡区，其中应变量是均匀分布的（以后会看到，这一条假设并非必要）。因而，构成此晶胚出现的能垒，不再包含界面能和弹性能两项，而只有此球体内的弹性应变能。到此为止，并未引入位错、软模声子或其他类型的静态或动态缺陷，只是把注意力牢牢地盯在不变平面上。下面分析过渡区内的能量。

图1.31示出母相、过渡区、及相应的平面不变应变。由图（a）可见，当由平面不变应变D形成马氏体后（侧面位移d），则在母相部分，也产生一个平面不变应变$\Delta(r)$，其位移矢量与D的位移

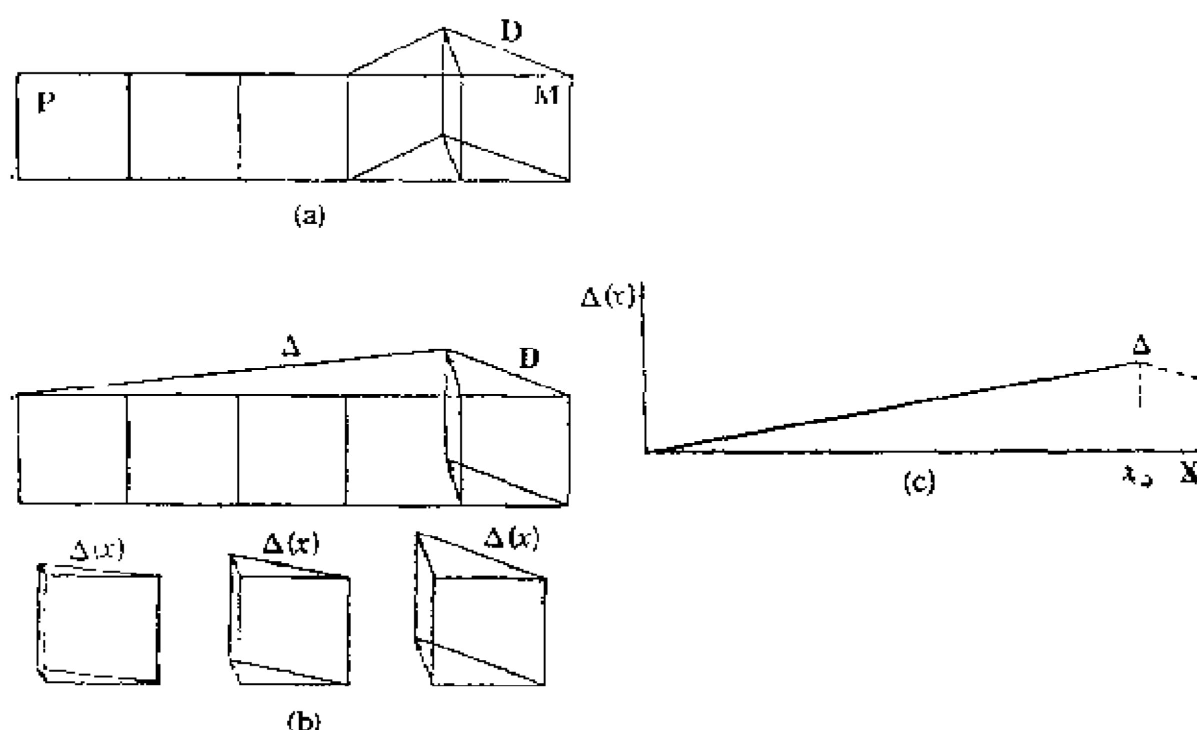


图 1.31　平面不变应变的稀释

(a) 马氏体的平面不变应变D和界面中的平面不变应变Δ

(b) 稀释后的均化应变

(c) 三角形的弹性应变波

矢量方向相反、大小相同，用δ表示。$\Delta(r)$的大小取决于过渡区的大小（宽窄），越宽则应变越小，越窄则应变越大。例如在本例的情况，若宽度为100层不变面间距，则$\Delta(r)$大约比D小两个数量级，因而这个弹性应变是很小的，这是平面不变应变D被稀释为$\Delta(r)$的结果。对于多数马氏体转变，不变面位移的大小在20%点阵常数值左右，经稀释后的应变，只有0.2%，多数材料的杨氏模量或切变模量为100GPa数量级，估得的弹性能只有几个J/mol，是很低的。

现在举两个定量的例子，来估算这种能量的大小。第一个是Fe-31%Ni合金中的马氏体转变，资料来源见文献[25]，转变的不变面法矢$\mathbf{p}'$及位移d为：

$$\mathbf{p}'=[0.1656 \quad 0.5770 \quad 0.7998] \tag{1.51}$$

$$\mathbf{d}=\begin{bmatrix} 0.047235 \\ 0.160115 \\ -0.152072 \end{bmatrix} \tag{1.52}$$

位移矢量的绝对值ε，大致上可反应这一转变的应变，即

$$\varepsilon=|\mathbf{d}|=0.22582 \tag{1.53}$$

这一应变在马氏体胚片的两侧，被稀释为一个低得多的应变Δ，漫散地分布在约100层不变面区域内，从而得到一个约化平面不变应变，$\Delta(100)$，其不变面与位移为

$$\mathbf{p}'=[0.1656 \quad 0.5770 \quad 0.7998] \tag{1.54}$$

$$\boldsymbol{\delta}(100)=\frac{1}{100}\begin{bmatrix} -0.047235 \\ 0.160115 \\ -0.152072 \end{bmatrix} \tag{1.55}$$

相应的总应变

$$\delta=0.0022582 \tag{1.56}$$

为了计算弹性应变能，采用类似于Cohen[27]的公式

$$E_i=cV_m(\mu\gamma^2+K\varepsilon_n^2) \tag{1.57}$$

其中V_m是摩尔体积，μ为切变模量，γ和ε_n分别为约化应变区的切

应变和体积应变、K为体积压缩模量，c为一个调节因子，数值在10以下，以补偿各种可能的误差，因而保证估出的弹性能为上界限值。由于d中的法向位移的部分为：

$$\mathbf{d}_n=\mathbf{p}'\mathbf{d}/|\mathbf{d}|=16\% \tag{1.58}$$

切向位移为

$$\mathbf{d}_t=84\% \tag{1.59}$$

因而（1.57）式中ε_n项引起的弹性能相对于γ项引起的弹性能甚小，可以在估计中略去。此外，Fe-Ni合金中一个无理面上的切变模量的具体资料难以得到，但由宏观切变模量和杨氏模量类比，绝对肯定$\mu<1.6\times10^5$MPa。而$V_m<8.5\times10^6\mathrm{m^3/mol}$，$c$采用5，则可得到弹性能

$$E_t<40\mathrm{J/mol} \tag{1.60}$$

这是一个上界值，实际的弹性能还要低得多。即使这样，这个值已比Knapp等[30]和Fisher等[31]估计的值低了3个数量级，关键的原因是平面不变应变的稀释作用。

另举一个Cu-40% Zn合金的例子[71]，其中马氏体转变的不变面法矢和位移为

$$\mathbf{p}'=[\bar{1},\bar{5},\ 5] \tag{1.61}$$

$$\mathbf{d}=\begin{bmatrix}-0.024024\\0.125163\\0.110452\end{bmatrix} \tag{1.62}$$

其总应变

$$e=|\mathbf{d}|=0.168649 \tag{1.63}$$

此合金的$V_m\approx8\times10^{-6}\mathrm{m^3/mol}$，杨氏模量约130GPa[72]，因而估计的弹性应变能

$$E_t<10\mathrm{J/mol} \tag{1.64}$$

比Fe-Ni合金更低，因为弹性模量较低。在许多铜合金中[73-77]，马氏体转变的过冷ΔT（即T_0-M_s）在6—20K之间，熵变在-(0.3—0.4) J/(mol·K)范围，因而自由能变化即相变驱动力足以克服这一能垒。

必须说明，这种弹性应变能的具体估算并不重要，重要的是在保证边界位移（以形成马氏体结构）的前提下，平面不变应变可以稀释，而且这种稀释程度从理论上来说是无限的。本节假定的100原子层大小，是参照了过去的模型，实际上可能更小些。事实上，Fisher[31]取切变0.35。若稀释100倍，则弹性能应降大约4个数量级，可以看出稀释的作用。但只有平面不变应变才能无限稀释，而三轴膨胀（或压缩）则完全不能稀释。介乎两者之间的，可能部份稀释，例如直线不变应变，可以分解为两个平面不变应变之积，即

$$\mathbf{L}=\mathbf{D}_1\mathbf{D}_2 \tag{1.65}$$

则其中任意一个平面不变应变均可无限稀释，从而使L得到部份稀释，而使弹性能下降。对于某一应变E，若可分解为一个平面不变应变D与另一应变之积，即

$$\mathbf{E}=\mathbf{D}\mathbf{E}_1 \tag{1.66}$$

其中E_1是一个应变量小于E的应变（不一定是平面不变应变），则因D可以无限稀释，从而E可以部分地稀释。

1.4.4 晶体学唯象理论的基础

Wechsler，Lieberman和Read[19,20]以及Bowles和Mackenzie[21,22]的马氏体转变晶体学唯象理论，是定量的理论，这在材料科学中并不多见。同时，这一理论取得的成功也是巨大的，获得众多的实验研究证实。自然也有与此理论不符的实验，如文献[78]。有关这一理论的内容在附录I中介绍。但是，这一理论仍是基于马氏体转变有惯习现象这一反复证实的实验事实，从惯习面（即不变面）存在出发，分别建立了形式略异、本质相同的唯象理论。但是，这一最根本的问题：为什么马氏体转变有惯习现象？即为什么转变应变必有不变面？也即为什么是平面不变应变、而不是其他类型的应变，控制着马氏体转变？这一唯象理论的基础问题，从未得到满意的解答。

前面介绍Olson-Cohen模型[4]，曾提到若为平面不变应变，

则弹性能最低[6]。但这一点并未得到论证，尤其是对于Olson-Cohen模型，马氏体晶胚出现在密排面上，而不是惯习面即不变面上，何以平面不变应变会使弹性应变能量低，十分令人费解。

马氏体转变由平面不变应变控制，必然与能量学有关。但要证明平面不变应变使弹性应变能最低十分困难。首先是同一些什么样的应变来比较?如何能把这些可能的应变搜集齐全?这些都是极不容易的。材料科学中，有些问题看似简单，而严格的论证则较为困难，例如面心立方点阵和密排六方点阵，是同样大小刚球的最紧密堆垛，这一点只是作为经验来接受，严格的论证只是最近才有可能，证明过程写成数百页纸，目前还无法判明推理是否完全正确。

因此，要解决唯象理论的基础，即为什么马氏体转变是平面不变应变控制时，必须走另一途径，即证明平面不变应变相对于其他应变，有无限的竞争力，即不管其他应变如何，平面不变应变自身，具有无限地降低单位体积内弹性能的能力。这恰恰是平面不变应变的固有特点，可以无限稀释。因此，认定了平面不变应变具有无限稀释的能力，也就解答了马氏体转变晶体学唯象理论的基础这一难题。

前面已证明，平面不变应变可以无限稀释，而三向等轴拉伸（压缩）完全不能稀释。为了论证的完全，还应证明凡非平面不变应变，必不能无限稀释。估计这个论证也是不简单的，可能的途径之一，是证明一切非平面不变应变，必含有三向等轴拉伸（压缩）的因子，即必有不可稀释的部分。幸运的是，即使还不能证明这一点，至少已经证明了平面不变应变是最具有竞争力的应变之一。

更为实际的问题是平面不变应变之间的竞争。为了得到马氏体结构，只需边界上有一定的位移条件，而不变面并非唯一，因而在实际材料体系中出现随成分改变而惯习面改变的情况，钢中就有{2 2 5}与{2 5 9}等不同的惯习面。有的合金中惯习面对成分变

化十分敏感。这些情况反映了同一马氏体转变中不同平面不变应变之间的竞争，可能与平面不变应变作为一种弹性波平面波的出现概率有关，将在以后再次提到。

1.4.5 形核模型

上节分析了出现一片马氏体晶胚以后的弹性应变能（也包含了界面能），看来在能量上是有利的，但这并没有解决这一片晶胚是如何出现的问题，在从无到有、从小到大的形成晶胚过程中，是否还有更高的能垒呢？在Olson-Cohen模型[4,8]中，是基于位错已经扩展到一定宽度后，开始讨论形核能垒与层错层数及温度的关系，而在开始扩展时，按他们的推理，还应翻越另一能垒，但在该模型中并未讨论。严格地说，首先应该讨论位错开始扩展后所越过的能垒，并作为形核能垒的一部分。

在D模型中，为了说明马氏体片状晶胚的出现，设想了一个动态的形核过程，基于在一定区域内因热涨落出现的平面不变应变的弹性平面波偶极子，概略地说过程如下：

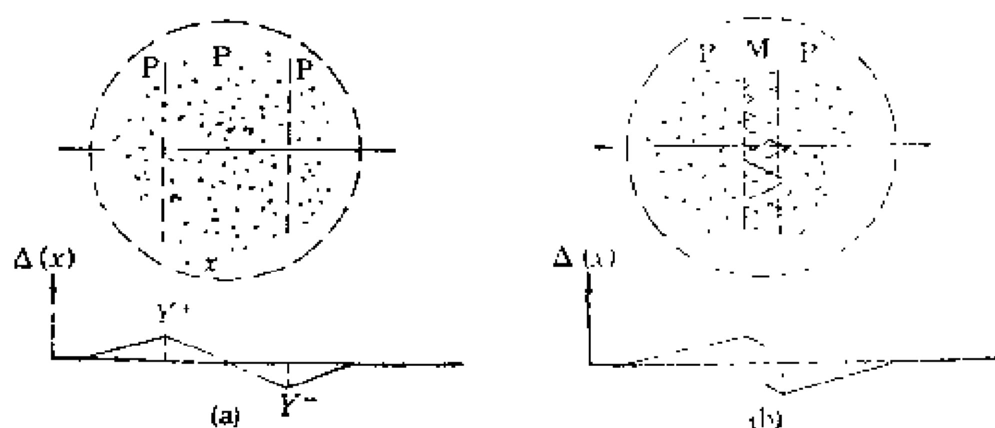
1．X域和Y偶的出现。因为热涨落，在一个适当大小的原子区域（例如说10^6原子），被称为X域，出现弹性应变波的涨落，若其中有一种是平面波，波面正好是马氏体转变的不变面，而且波峰处相当于马氏体转变所需的位移，并且这种波呈现为一对偶极子，即由一对大小相同，但位移方向相反的弹性平面波构成，这种由平面不变应变构成的弹性平面波偶极子，称为Y偶极子，简称Y偶。

2．Y偶湮灭出现马氏体结构。Y偶极子的正负两个波峰Y^+与Y^-的中心，是两个相对平动后的不变面，具有形成马氏体所需的位移。但由于相距较远（例如说100原子层），在这两中心平面之间仍是一个小应变的区域，相邻层间的位移大约在d/100的数量级，因而仍是母相结构，只是处于弹性应变状态下。若Y^+与Y^-相对运动、靠近并重叠后，偶极子湮灭，在两中心平面只相距2—3个原子层时，由于其两侧位移分别为d和－d，故这2—3

个原子层被应变（主要是切变）成为马氏体结构，这就形成了上节所述的晶胚以及所附着的过渡层区域。

3。X域缩聚形成一对界面。在上述的晶胚和过渡层结构中，晶胚迅速向两侧扩展，并释放出相变自由能。同时，过渡层既向两侧外向推移，同时本身厚度又不断收缩、凝聚，最后形成一对明锐的相界面。在过渡层收缩过程中，弹性应变能上升，同时出现界面能，这两项均由相变自由能的下降提供补偿。此时马氏体具有正确的结构，有适当的直径和厚度，有与母相分开的明晰的界面，因而是一个完整的马氏体晶核，于是形核过程完成，进入长大阶段。由于在这一模型中没有临界尺寸、临界晶核等概念，因而形核和长大过程没有明显的分界。马氏体晶胚在侧向扩展的同时，自然也会径向扩展，而过渡区也在两侧外向推移中变薄，最终马氏体片因弹性应变能（还有界面能）与相变自由能的平衡而停止长大，整个过程以10^{-6}s计数，可见是一幅多么活跃动荡的图景。

图1.32示出这一模型的过程示意图。图（a）示出X域和Y偶的形成，X域是一个含原子数10^6数量级，半径为100原子间距数量级的区域，这样大的范围也正是过去多数形核理论所考虑的尺度。在此区域内，因热涨落而出现一对弹性应变平面波的偶极



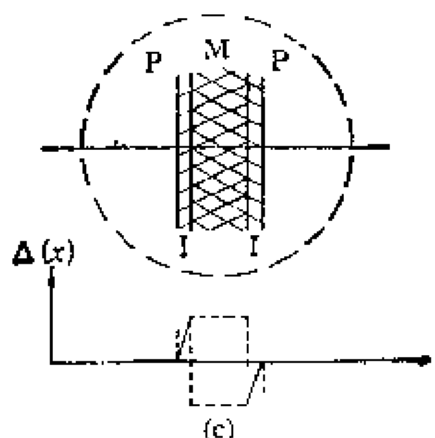


图 1.32 形核过程示意图

(a) X域和Y偶的出现

(b) Y^+和Y^-两极的靠拢并出现马氏体结构

(c) 过渡区缩聚成一对明锐的界面

子。此时在X域内仍为母相结构，但因弹性应变而畸变，在图中用分散的小点表畸变态。偶极子的两极中心，是一对平行的不变面。图（b）表偶极子的两极Y^+和Y^-相对靠拢，至两中心平面相距两原子层，则其间正具有平面不变应变D，因而成为马氏体结构，所含的弹性应变能自然消失，但两侧仍带有处于弹性应变态的过渡层，为母相结构。可以看出，X域以外的原子排列为正常的母相结构，区域的中心为两层马氏体结构，而X域整个处于低应变的平面不变应变状态，两相结构之间没有明锐的界面，自然也没有界面能，这是这一模型的一个重要特点。图（c）表马氏体胚片向两侧扩展，过渡区域收缩成一对明锐的常规共格界面，此时马氏体和母相均处于正常结构，出现界面和界面能，成为一个马氏体晶核，下一步就是长大过程了。

1.4.6 X域和Y偶的形成

在一个含有大约10^6个原子的X域内，出现应变量约为千分之几的弹性应变波偶极子，尽管能量不高，但毕竟是自由能上升的过程，因而是形核过程的第一能垒，必须作出分析。先考查Y偶的一个单支Y^+周围的能量情况。在Fisher，Hollomon和Turnbull [31]

的形核计算中，设弹性应变能均匀地分布在半径为r的球体体内，其中暗含了两层假定，一是在r球之外弹性能突然为零，二是整个均匀应变场均为切应变场。事实上，这两点若从弹性力学的角度审阅，很难严格成立。首先，应变场似应在球表面层附近逐渐衰减到零。其次，与马氏体圆片相交的球表面壳层处，为了保持材料的连续性，不可能是单纯的切应变。

对于D模型中的Y^+单极的应变场，仍大体按照Fisher等[31]的假设，基本上均匀地分布在以r为半径的球形体积内，则球内的广大地区为平面不变应变$\Delta(r)$，但在球表面附近的壳层[半径r到$r+\delta r$，表为$O(r, \delta r)$]内，应变由均匀分布的$\Delta(r)$逐渐至零。图1.33示出这一应变渐降的这一球壳层$O(r, \delta r)$。如果把Y^+中心不变面的法线与球壳O的交点称为南北极，不变面本身与此球壳的交线则是赤道。可以看出，南北两极附近的应变场比较简单，

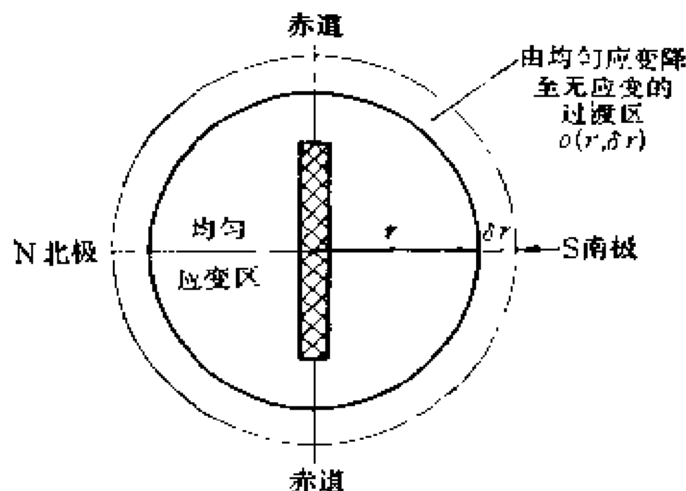


图 1.33　应变区的边界壳层

可以是均匀（即直线）下降的，如图1.34(a)所示，此时位移$\delta(r)$和一次导数连续，也可以是无限均匀下降的，即$\delta(r)$的任意阶导数均连续。无论如何，从弹性应变能的角度来看，总是从球体内部的均匀弹性能降至零，因而这种应变衰减的细节并不重要。

在球壳O的赤道附近，应变衰减情况比较复杂。一个最重要的特点是，这一带内的应变，可能有高于球体内均匀应变之处，形

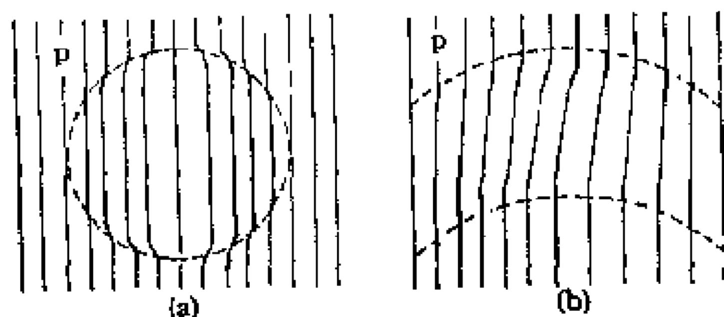


图 1.34　应变球域的 (a) 南北极和 (b) 赤道附近的应变

成局部的高能区。如图1.35所示，若暂时把Y'的应变区看作矩形域，纸面为包含d的面（不变面可能不再垂直纸面），则垂直于Y' 中心不变面的面$ABA'B'$之间的应变过渡区，明显不再是不

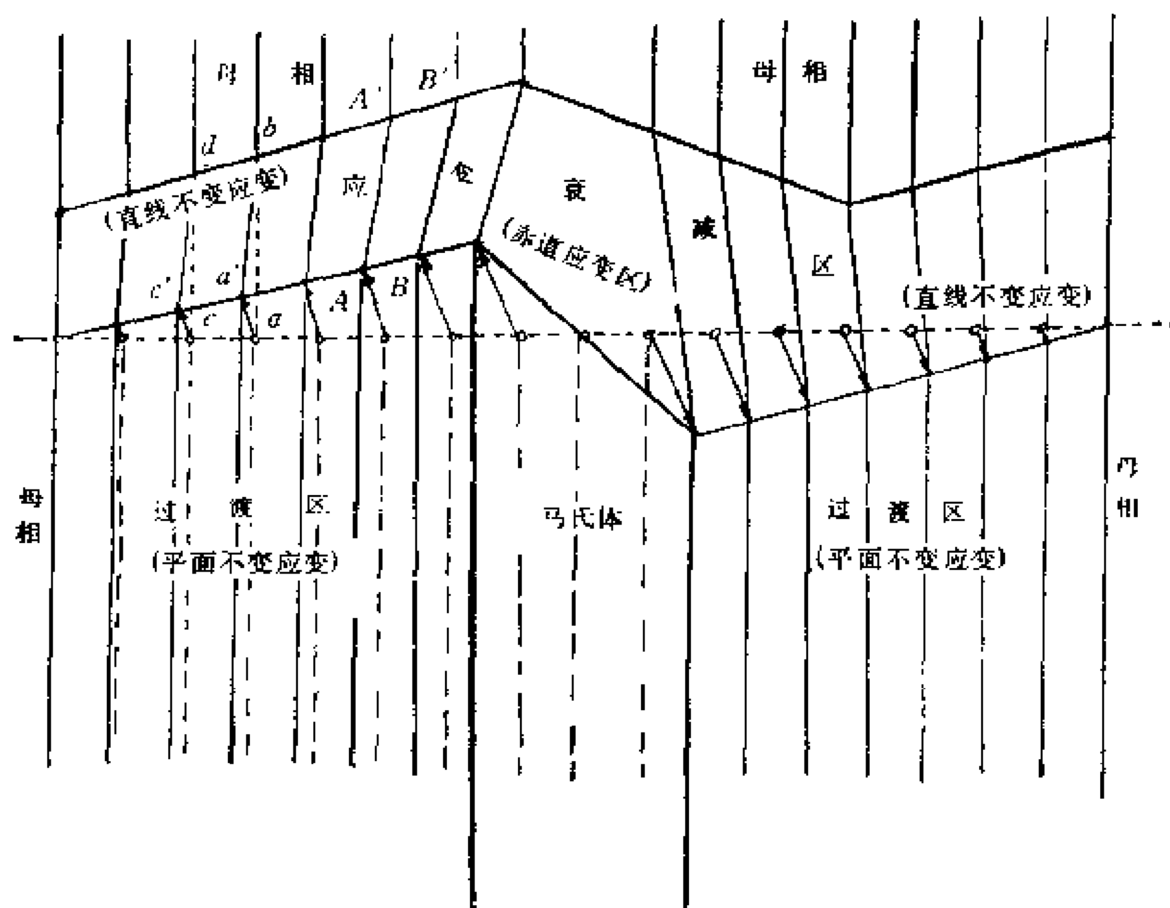


图 1.35　方形应变域端部的应变（相当于球域的赤道处的应变）

变面，而有一个绕垂直于纸面的轴的转动，且各界面有不同程度的收缩，例如ab面变为$a'b'$面，cd面变为$c'd'$面，等等。但在此应变过渡区中，穿过纸面的线（在原不变面上），却没有转动没有畸变（伸长或收缩）。因此，这个应变是直线不变应变，可以看作是平面不变应变$\Delta(r)$与另一平面不变应变乘积而成。在附录I中可以看到，一个直线不变应变由6个独立参数决定，当已知第一个平面不变应变的不变面法矢及位移后，另一平面不变应变的不变面法矢和位移可以被计算出来。总之，应变过渡区的直线不变应变区的单位体积弹性能有可能高于内部的均匀应变弹性能，这在图1.35也可直观看出，如果AB和$A'B'$的距离越大，则应变越小。这实际上就是构成直线不变应变的第二个平面不变应变在稀释，从而可使过渡区的弹性能下降。因而球壳的厚度决定了赤道附近弹性能的大小。在南北极与赤道之间球壳，单位体积弹性能界于两者之间。

1.4.7 Y偶的收缩与湮灭

一个带过渡区的马氏体晶坯微片的出现，是一形核模型理应说明的过程，如果要简单地处理，可以认为是依靠能量涨落和结构涨落出现的，而不细究其过程，因为这种晶坯所具有的能量甚低，每mol不到50J，只是等于热运动能的小部分，这种考虑正如Olson-Cohen模型是在层错充分扩展以后开始考虑一样。已有学者指出[17]，这种考虑叫“end-point”考虑，是不尽完善的，因在达到这种起始状态前，可能还有能垒。因而，在新的形核模型中，宁可一步步细加探讨。

在出现X域与Y偶以后，必须Y偶的两极相向运动，互相靠拢，才能出现马氏体的结构。但如果直接简单地发生这一过程，会引起两极Y^+和Y^-之间应变的急剧增加，在能量学上是不利的，如图1.36(a)(b)所示，现在另外设想一个过程，若有一个位错，其Burgers矢量为b，而b的方向大小正好为2d，则当此位错在Y^+和Y^-之间扫过，两极会迅速靠拢，出现马氏体的结构，如图1.36

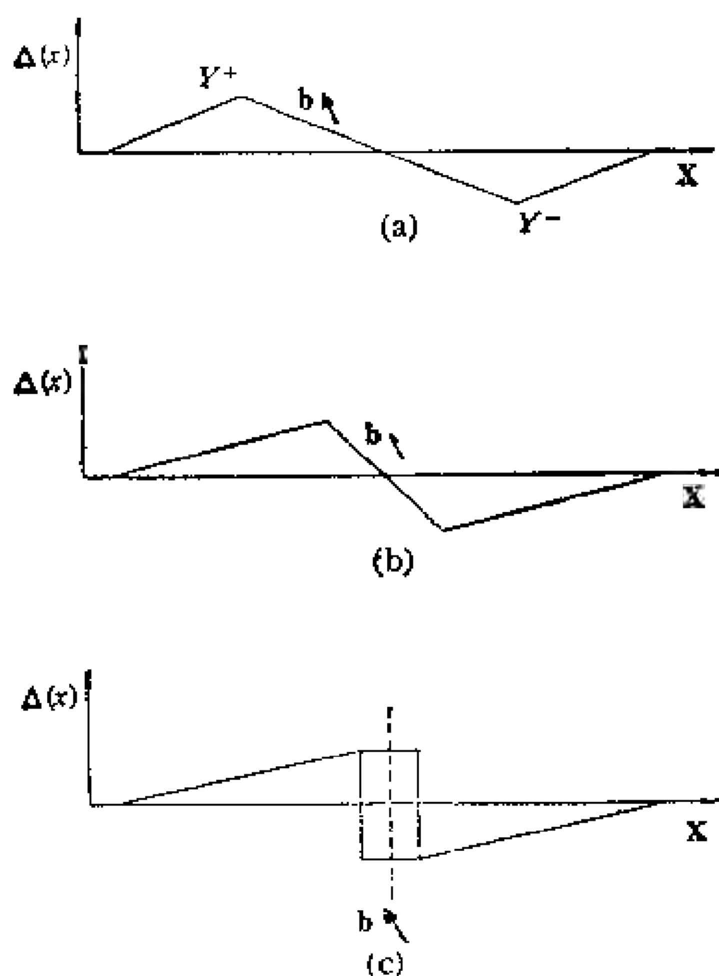


图 1.36　Y偶的收缩和湮灭

(a) Y偶和Y位错

(b) Y偶的均匀收缩

(c) Y位错扫过引起的收缩

(c)所示，位错扫过后，由于两极靠近而出现马氏体胚片，原来两极间的应变区消失，弹性能消失，因而是一个能量下降的过程，在能量学上是有利的，因此，如果有这样的位错存在，Y偶收缩的问题就解决了。但是，一般而言，此处的b不是晶格矢量，此位错不是实际晶体中存在的位错，但如果它是某一晶格位错的分量，则Y偶收缩的问题也解决了。在最不利的情况下，则需自发地生成一个这样的位错，于是，Y偶收缩可能碰到的最高能垒，是一个这样的位错的生成能量。

一根位错线的自由能E_s，按文献[79]，约为

$$E_s \approx \mu|\mathbf{b}|^3 = \mu b^3 \qquad (1.67)$$

其中b为Burgers矢量b的大小，若b值为1个点阵常数，则这个能量相当高，大约为每原子1eV或10^5J/mol的数量级。但考虑所位移的矢量d通常比点阵常数小得多，大约小1个数量级，则这种小Burgers矢量的位错的生成能大约在100J/mol的数量级，与X域与Y偶的能垒为同一数量级，是可以通过热涨落来克服的。因而，从原则上来说，马氏体的均匀形核，即不借助于任何缺陷，是可能的，但毕竟非均匀形核占有主导地位。

现在简单地探讨一下非均匀形核的情况。如果晶体中的位错，含有Y偶收缩所需的位错分量，称为Y位错，则Y偶收缩可能是能量下降的过程，不再有能垒。现在以前面的Fe-31%Ni合金[25]为例来说明。该合金的不变面的位移矢量为

$$\mathbf{d} = \begin{bmatrix} -0.047235 \\ 0.160115 \\ -0.152073 \end{bmatrix} \approx \frac{1}{18}\begin{bmatrix} -1 \\ 3 \\ -3 \end{bmatrix} \qquad (1.68)$$

这一模型的一个重要特点，是对Y位错的Burgers矢量没有严格要求，对位错及层错的排列和组态也没有严格要求，因为马氏体晶胚的原子排列不依赖Y位错来建立，而只是借助于Y位错来帮助Y偶收缩。现在，因面心立方点阵的母相中的晶体错为$\frac{1}{2}\langle 110\rangle$型，而且通常分解为Schokley不全位错，即

$$\frac{1}{2}\langle 110\rangle \rightarrow \frac{1}{6}\langle 121\rangle + \frac{1}{6}\langle 21\bar{1}\rangle \qquad (1.69)$$

因而母相中处处都可能有$\frac{1}{6}\langle 121\rangle$型的位错。设想另一种位错分解：

$$\frac{1}{2}\langle 1\bar{1}0\rangle \rightarrow \frac{1}{6}\langle 00\bar{1}\rangle + \frac{1}{6}\langle 3\bar{3}1\rangle \qquad (1.70)$$

则分解后的第二个位错恰恰是Y位错，可能帮助Y偶收缩。从位错分解（1.70）的本身来看，因位错线自身弹性能为μb^3，故这种分解在能量上是可能的。但这种分解会在分解的位错之间留下能

量极高的不规则错排区（不是常规意义上的层错），因而在一般情况下不会发生。但马氏体形核中发生这种分解，其中$\frac{1}{6}\langle 1\bar{3}3\rangle$位错扫过Y偶的正负两极之间后，原来的平面不变应变与错排区均消失，出现马氏体结构，只在马氏体胚片的边缘留下一个不全位错环，因此，这个过程使Y偶以及其位错的能量均下降，能自发进行，没有能垒。

对于Cu-40%Zn合金，也可以作类似的考虑，(1.43)式中表示的d大约相当于$\frac{1}{48}[\bar{1}55]$。而母相若看作体心立方点阵（实际是有序相DO_3，但不影响分析结果），则晶体位错为$\frac{1}{2}\langle 111\rangle$类型，则可能发生下述分解。

$$\frac{1}{2}\langle 111\rangle \rightarrow \frac{1}{24}\langle 155\rangle + \frac{1}{24}\langle 11\,7\,7\rangle \qquad (1.71)$$

分解所出的第一项，大约相当于有2倍d长的Y位错，能有力地促进Y偶收缩。

1.4.8 X域的收缩与凝聚

在厚度只有2，3层的马氏体胚片出现以后，会在径向和厚度方向迅速扩展，其驱动力显然是马氏体和母相的自由能差。与此同时发生的过程可能是应变过渡层区也向外推移，但层厚不断收缩，最后凝聚为一对明锐的界面。此时自然出现与弹性应变能可区分的界面能。估计这一过程甚为复杂，原因是过渡区的外向推移和本身收缩两过程交织在一起，可以出现各种可能。这两过程本身都会使弹性应变能增高，都必须相变自由能作为驱动力，因而整个的能量学决定了具体过程。一般而言，可以用图1.37来示意地说明。图1.37（a）中M表马氏体胚片，I表过渡层。如果马氏体增厚，而过渡层在保持厚度不变的情况下外向推移，由于马氏体片侧面上的切位移加大，过渡层的弹性应变能会增加。自

然过渡层减薄，则所占体积减小，导致总能量下降，但这种下降是按过渡层厚的一次方下降，而弹性应变也按一次方上升，因而弹性应变能按2次方上升。因而，过渡层外推收缩过程中的弹性能上升来自上述两个方面。图1.37（a）中示出原为过渡层的一个小薄层m现变为马氏体，则在其余的过渡中引起弹性应变的上升。

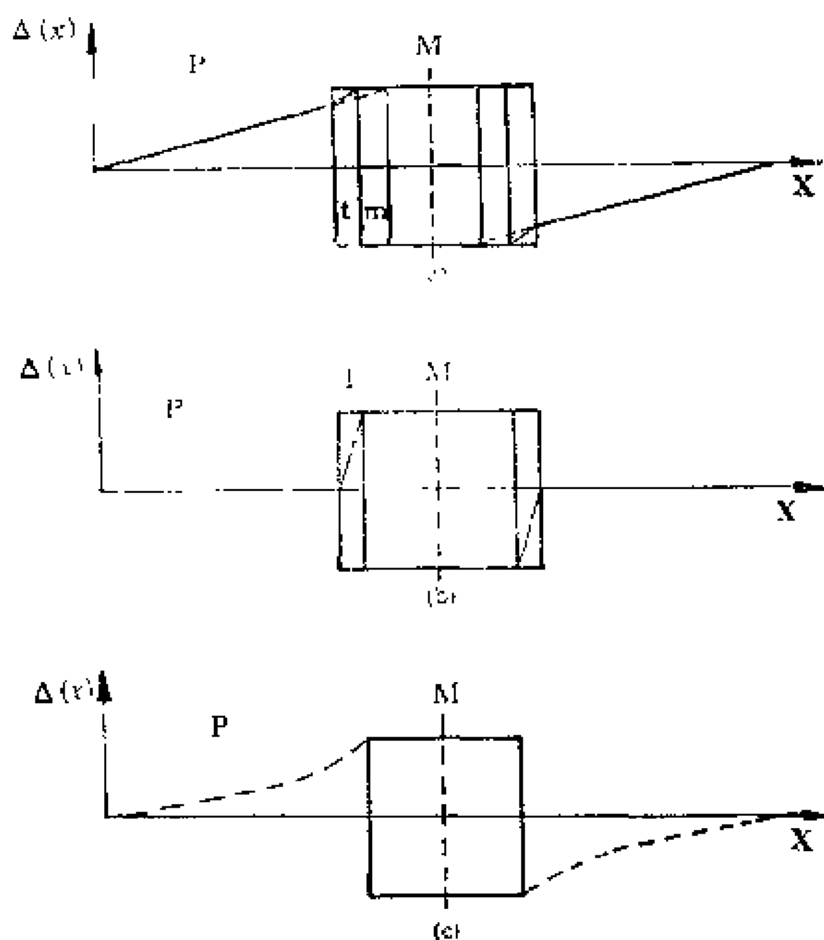


图 1.37　X域的收缩和凝聚

(a) X域收缩的开始

(b) X域凝聚成的一对界面

(c) 马氏体胚片锁住的介稳过渡区

图1.37（b）示出过渡区最终缩聚为一对明锐相界面的情况。这个过程不像表面上看来那么简单，有几方面的考虑。一是对马氏体圆片的径向边缘，前面曾说过，该处的弹性畸变能较高，不处于平面不变应变状态，因而在马氏体片增厚时，边缘也许不能

同步地增厚，马氏体侧面可能会因而改变形状，不能保持平面，此外。径向边缘扩展过程中，也可能遇到阻碍（如晶界等），不能继续向前发展，并且增厚也受限制，也会影响到马氏体片的形状，逐渐向薄片扁球形(oblate spheroidal) 过渡，这 会影 响到到过渡区的弹性能。另外一个很重要的考虑是：过渡区原是一个平面不变应变的弹性应变区，按设想的100原子层的数量级 估 计，弹性应变在0.2%以下，而在马氏体增厚及过渡区收缩的情况下，应变增大，再认为是弹性应变则不合理，应看作某种可以运动的塑性区，即某种塑性波。但更好的办法是看作一层厚度不断变化的、位置不断移动的界面位错层，这样可以直接应用Bilby等[23, 24]引入的概念和结果，连续分布位错的概念特别适于描述这种情况，因具有极大灵活性。特别重要的是，这种由弹性应变向塑性形变（界面位错层）的转化，使弹性应变能的上升得到迅速的截止，进一步 增 加 变 形，能量（或功）只作线性增长，且比例常数是一个远比切变模量为小的值。这种情况很像应力应变曲线，在超过屈服极限以后变平，曲线下与横轴（应变）间的面积表能量或功。这一点，在考虑能量学时至关重要。

图1.37（c）设想可能出现的某种介稳状态，此 时 过渡层受阻，既不外推，也不再收缩。这种情况，可能出现在温 度处于M_s附近，相变自由能不足以克服过渡区收缩引起的能量升高。另一方面，这种马氏体胚片带过渡区的组态又不能消失。因为这个消失过程，恰是前节所述Y偶收缩湮灭的逆过程，即低能的马氏体胚片变成高应变高能量的母相结构，再经Y^+和Y^-分离，然后Y偶与X域消失，这一系列过程是难于自发进行的。因而，马氏体胚片像一把锁，把两块过渡区锁在一起，相变自由能既不能使马氏体胚片增厚，返回又不可能，就会暂时停留在这种介稳状态。

马氏体胚片的出现，总会引起一定的自由能下降，有可能使弹性应变过渡区调节其厚度，使其内部原子排列处于某种较低能量的组态。这种较低能量的组态，是与母相与马氏体的点阵类型有关的某种中间结构，而不是连续介质力学所决定的力学组态。

这种可能性的提出，是基于实验结果，在接近M_s温度的预马氏体转变阶段，在透射电镜的选区衍射图上出现附加斑点和“花呢”(tweed)状的形貌，后面再述。

1.4.9 形核概率

对于这种新建议的马氏体形核模型，可能有一个不高的形核能垒，需要依靠能量涨落来克服。同时，在新相出现过程中，也必需一种特殊状态(X域和Y偶)的出现。即需要依靠一种结构的涨落来实现。这两种涨落，决定了马氏体形核的概率。自然，如果在这个形核模型中引入某些机制，例如缺陷或软模声子，是完全可以处理为无能垒的过程。但是，从下面的分析可以看到，这种模型的能垒如此之低，依靠能量涨落来克服的概率如此之大，几乎与无能垒过程没有区别。但是，结构涨落的情况很不相同，所需结构（不是指马氏体结构，而是指X域与Y偶）出现的概率甚低，很可能是马氏体形核的控制因素。

1. 形核能垒和能量涨落

在所建议的形核模型中，有两个过程可能需翻越能垒，一是在出现X域和Y偶时，因为含有弹性应变能，这个能垒的高度，对各种合金系统，均在10—100J/mol范围之内或之下，不可能更大，另一个过程需翻越能垒是Y偶的收缩，如果完全依靠自发形成适当的位错来完成，则所涉及的能垒高度可能是100J/mol的数量级。为了降低这一能垒，还可以设想是由一列更小Burgers矢量的微型不全位错，甚至连续分布位错组成，其合成的Burgers矢量为马氏体胚片出现所需的位移矢量d的2倍。但这并不一定必要，因为更大的可能，是如前面所分析的，由晶体实际位错的分量提供所需的Burgers矢量，则Y偶收缩过程可以是一个无能垒的自发过程。总而言之，按最困难的过程来设想，最高的能垒高度，是100J/mol的数量级。

现在考虑依靠能量涨落来克服这一能垒的可能性。能量涨落按正则分布处理[30]，所考虑的统计系统为一个X域的范围，约为

100个原子直径，含原子数10^6的数量级。所考虑的统计系统为宏观尺度，例如一个晶粒，线尺度0.1mm，含原子数10^{23}数量级。每个统计系统边界处的原子数为10^4数量级，因而与表面有关的能量占体积能量的约百分之一，可以暂时忽略不计。统计系综所含对象系统的数目为10^{17}数量级，足够巨大。以上条件说明可以用正则分布来处理此处的能量涨落概率，即

$$p_1 = e^{-\frac{G_z}{RT}} \tag{1.72}$$

其中G_z为能垒的高度，用J/mol单位，故式中用气体常数R，代替常见的Boltzmann常量。代入前面提到的最高能垒100J/mol，考虑到一般材料系统的M_s在200—300K之间，则

$$p_1 \approx 0.96 \tag{1.73}$$

由于系综内系统的数目为10^{17}数量级，因而具有足够能量涨落的系统数目也是这一数量级。这是一个巨大的数目，说明形核的能垒是不足道的，不构成形核的困难。

2. XY结构和结构涨落

按照经典形核理论[64]，新相的出现依靠结构涨落，即在母相中随时随地出现，又很快消失的，具有新相结构的小的原子集团。这种结构涨落又叫异相起伏，表示这些小的原子集团的出现是时此时彼、时起（出现）时伏（消失）。这些原子集团的大小按统计规律分布，由与此集团相联系的能量决定。自然，所谓的异相起伏自然不只是新相结构原子集团的起伏，还应有任何一种可能出现的结构集团的起伏，但只有那些对形核有帮助的结构的起伏才令人感到兴趣。

对于所建议的马氏体形核机制，所必须的结构涨落就是X域和Y偶的出现，以后称为XY结构。所属的XY结构就是一个平面不变应变的弹性应变区，此弹性应变为该马氏体转变的平面不变应变(可由晶体学唯象理论求得)的约化应变$\Delta(r)$，并成偶极子出现。从波动的角度来看，这是一个弧波波包，可以是一个驻波，即在原地随时间改变振幅，也可以是行波，即在晶体中运动，同

时随时间而改变振幅，这里的振幅，就是正负波峰（Y^+和Y^-）处的弹性位移。可以看出，这种XY弧波波包是以不变面p′为平面波波面，δ(r)为波矢方向，以X域为范围，以不变面位移矢量d为最大振幅的弹性应变偶极子平面波。

现在试图粗略地估计这种XY孤波出现的概率。前面说过，这种结构所伴随的能量不高，从能量涨落的角度来看出现的概率甚高，但是，具有这种能量水平的结构非止一种，XY结构只是其中之一。因此，需尽量设想各种可能的结构，估计XY所占的份额。可以作如下的考虑。

①如果在母相中的结构涨落，主要以各种弹性应变区的形式出现，也即不考虑另外的相结构出现的可能性，则这些应变区的形式将可能是各种各样的。由于一个区域出现了一种结构就不能同时出现另一种结构，因而结构的涨落具有“不相容”性。现在进一步限定，出现的弹性应变区均以“波”的形式，即相邻原子的弹性位移是有一定规律的。弹性波的种类很多，有平面波、柱面波、球面波、扭转波、弯曲波、等等。在能量相同的这些波中，各应占有一定的概率。考虑到波的种类众多，难以全计，粗略地估算认为平面波在各种与之等能量的众多波中，所占概率为百分之一，即10^{-2}。

②估计在弹性平面波中，具有适当波长的孤波的概率。可以这样来看，为了保证适当的波峰高度（弹性位移矢量d），应有一个恰当的波长，波长太短，则位移梯度（弹性应变）太陡，弹性能成平方上升，因而概率很小。若波长太长，波包所占空间大（正比于长的三次方），一定的体积内（如一个晶粒，或1mol物质，或10^{-1}mm线尺度对应的宏观体积）所能分割的系统数太少，概率也下降。因此，有效的结构涨落对应于一个恰当的波长，现仍假定为100原子直径的数量级。现在需要估计这种恰当波长λ_m的波在各种可能波长的波中所占的概率。这里有多种处理方法，其中之一就是仿照Debye处理固体热容的方法[80]，定出一个上限频率（截止值），认为在此以上的频率不存在，然后分析各种频率所占份额。在这

里，把波长λ的倒数K（波数）作为参数建立一个相空间。以λ_m对应的波数K_m为半径作一球体，设大于K_m的波不存在（因弹性能太高）。取K_m附近一个薄球壳所占的体积，与全球体积之比，作为λ_m波的概率。这里的相空间，不是量子化的，其实质只是表示一定量物质体积所能分割成的不同λ值的波包数目。现设K_m处的壳层厚度为1—2原子直径，则恰当波长的XY孤波出现的概率大约为百分之一，即10^{-2}。

③在具有最佳波长的弹性平面波中，以所需的平面（法矢p′）为波面的波才是有效的。而各种方向的波面均有出现的概率。如果把形核物质处理为各向同性的弹性连续介质，则各方向波面出现的概率应相等。如果是各向异性的晶体，各种方向的波面出现的概率自然不同。在这里，这种形核模型可能与软模理论发生联系。换言之，软模理论所描述的，在一些晶面、一些晶向上的点阵振动模式，例如在体心立方点阵向面心立方点阵的马氏体转变中的（110）[$\bar{1}$10]模式，可能并非直接作用于形核过程，而是作用于XY结构的起伏之中。在这里，软模理论的几乎全部设想均能容纳在此形核模型的框架之中。现在为了作一般性讨论，不涉及具体的结构，在此把形核物质处理为各向同性介质，认为各种方向的波面出现的概率相同。各种空间方向构成一个空间角4π的球，考虑波面法矢测量的误差0.1°，即空间角的弧度数约为10^{-5}数量级，这就是波面为p′相对于各种可能方向波面所占的概率。

④在上述具有恰当波长、正确波面的弹性平面波中，波面（不变面）位移方向必需正好是马氏体转变所需位移d的方向。在这里的考虑与上述与波面的考虑完全相同，即一定方向的软模可能起很大作用，作为一般的讨论，则可认为是各向同性介质，则波面位移方向为d方向的概率也是10^{-5}。

综上所述，出现XY结构起伏的概率的数量级为$p_2=10^{-14}$。相对于能量涨落的数量级来说，这个结构涨落的概率要小得太多了，因而很可能在形核过程中起控制作用。

3．形核率分析

按照前面的讨论，克服形核能垒的能量涨落的概率接近于1，而出现所需的结构涨落的概率为10^{-14}数量级。因此，按这一形核模型的马氏体均匀形核的概率为

$$p_0 = p_1 p_2 \approx 10^{-14} \quad (1.74)$$

此处考查的统计系统设为1mol，原子数为10^{23}数量级，所考虑的系统为X域的尺度，约含原子10^{-6}数量级，因而可能形核区域的数目为10^{17}数量级。因此，马氏体均匀形核的初始形核率数量级为

$$N_b = 10^{17} \times 10^{-14} = 10^3 \mathrm{mol}^{-1} \quad (1.75)$$

由于形核在到达该温度的一瞬间形成，同一温度不再有新核，因而形核率N_b中不含时间的量纲，相对于一般合金系统中观察到的马氏体形核率，N_b的数值的太低。但按照Christian[64]关于形核理论的划分，“可以觉察”的形核率为$10^6 \mathrm{m}^{-3}\mathrm{s}^{-1}$，则此$N_b$已高出几个数量级。从这个意义来看，马氏体的均匀形核是完全可能的，这是这一形核模型与过去的各种马氏体形核模型的根本不同之处。

但是，不少实验表明[55-57]，马氏体形核具有明显的非均匀形核的特点。此外，上述的均匀形核率也过于偏低。因此，必须认为马氏体形核中，非均匀形核占统治地位。这种非均匀形核，可以来源于上述的软模声子，可以在很大程度上促进马氏体形核的结构涨落过程，而结构涨落又是形核的控制性过程。此外，晶体缺陷的存在，尤其是位错，对所建议的形核模型，也有极为巨大的影响。前面在叙述Y偶的收缩时，已提到位错的作用，可以使Y偶的收缩由原来的高能垒过程，变成无能垒的自发过程。同时，位错也应该促进马氏体形核的结构涨落，因为所需的结构，无非是一个弹性应变场，在位错附近的弹性场中，总能找到与马氏体所需XY结构相似的区域，这就会为必须的结构涨落提供有利的位置，从而大大提高有效结构涨落的概率。特别值得注意的是，此处只需位错附近的弹性应变场的促进作用，而不必须位错本身具有特定的结构或组态，这是与经典的缺陷形核理论，如Olson-Cohen理论[4,6]所根本不同之处。正因为对位错组态没有

严格要求，可以认为一般位错均有不同程度的促进作用，在此基础上，可以对马氏体的非均匀形核率作一个估计。一个中等位错密度（约为10^8cm^{-2}）的晶体中，若有百分之一的位错能触发马氏体形核，同时再考虑其他缺陷（如层错、晶界等）的促进作用，则可以合理地把非均匀形核率估计在$N_n=10^9mol^{-1}$的数量级，以与观察到的实际情况协调。

1.4.10 挠率张量与马氏体形核

前面叙述了D形核模型的能量学，至于其晶体学方面的特征，自然地与唯象理论协调一致，因而满足取向关系，惯习关系等马氏体转变的晶体学要求。此外，形核的动态过程，也由X域和Y偶的出现、运动、湮灭等系列活动构成。以上的描述，构成一幅简明的图象。但整个马氏体形核过程，也可以用一个较为严格统一的数学方法来描述和刻划，其中心概念是Bilby等[18,19]提出的位错晶体的挠率张量。

先设想一个马氏体形核的动态图景。这是一个放慢一百万倍的电影：接近M_s温度后，在母相内的一些地区发生骚动，这种骚动可以用每个原子的运动轨迹与时间的关系来描述，也可以用每个微区（小到原子尺度，大到几百、几千、几万原子的区域）的畸变情况随时间的变化来描述，挠率张量就是最适合刻划这种畸变的概念之一。原来母相是规则排列，原子排列可用全空间一致的参考坐标系来描述，所涉及的空间自然是欧几里德空间，其曲率张量和挠率张量都等于零。有关曲率张量和挠率张量的知识参见附录Ⅰ。原子骚乱开始后，各处原子排列发生畸变，可用该点的一个局域仿射坐标系来描述，由此局域坐标与全空间参考系的变换关系，可以引入挠率张量的概念，表征每一点的畸变情况，此时各点的挠率张量不再为零，且各点不同，随时间而变。但在一个较大的范围内积分，挠率张量保持为零。即是说把此区域作为一个整体，挠率为零，而且边界以外原子仍是正常排列。各点的挠率张量随时间而变，渐渐归并成为一对平面不变应变的弹性平

面偶极子，也即在此区域内，形成具有方向相反、大小相等的挠率张量的一对反对称畸变区域。正负两极的应变，是两部分的挠率张量分别积分的结果。很显然，在这整个区域之外，由于偶极两部分的抵消，总挠率张量仍然为零。以后偶极子收缩，应变区收缩，形成相界面，则相界面的挠率张量，表征了界面的结构（界面位错），其积分仍为马氏体转变的平面不变应变。以后马氏体晶核长大，仍是以挠率张量为表征的界面的推移，在马氏体片长得较大，界面因降低弹性能而不再保持平面形状，不再平行于不变面的时候，界面仍保持其挠率张量。因而，挠率张量可能是对马氏体转变一个比较本质的描述。马氏体转变就是晶体中的挠率张量在一定的守恒条件下的变化过程。图1.38示出这一过程，原始状态是一个零挠率的平静的母相区；图(a)表示出现骚

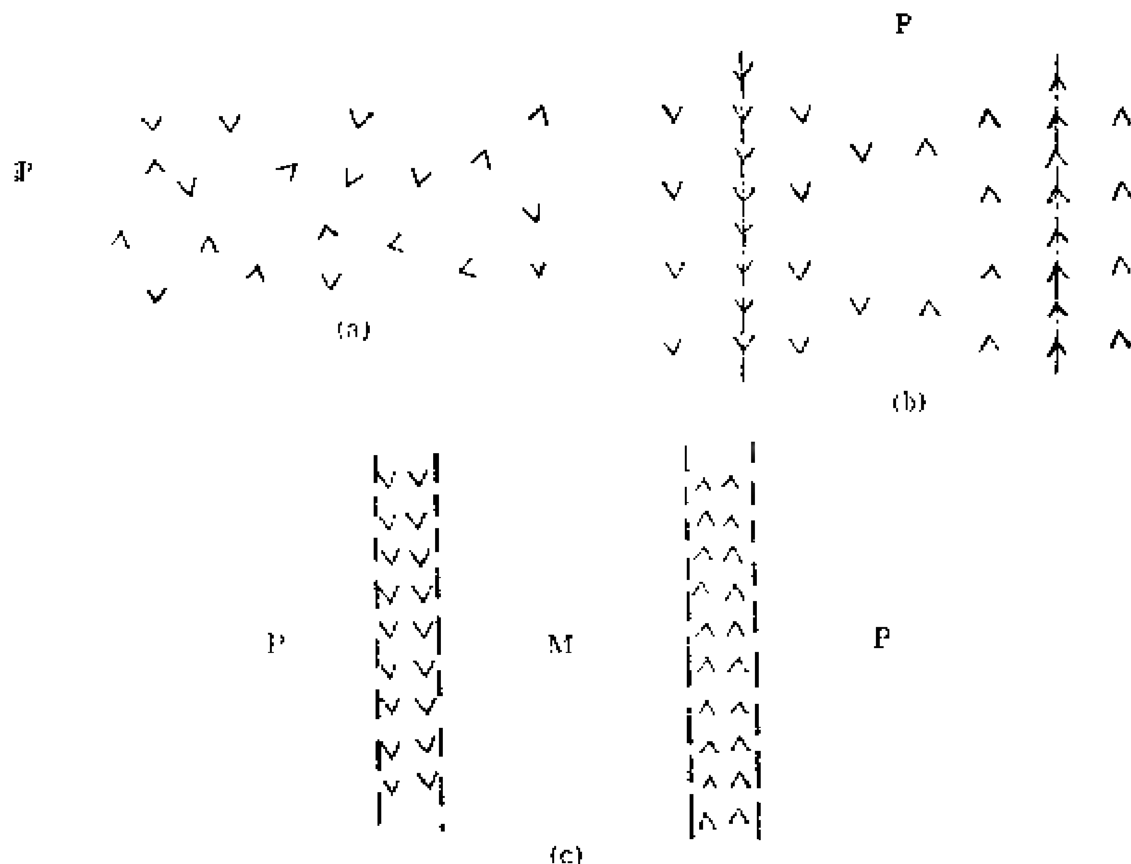


图 1.38　从挠率张量的变化来看马氏体形核

(a) 原子开始骚乱，各处出现不同的挠率张量

(b) 挠率张量归并于不变平面应变偶极子的弹性场中

(c) 挠率张量缩聚于一对界面中

动，各点挠率不同，不断变化的区域，此时遵从两点，一是整个区域的积分挠率张量仍为零（守恒），二是相邻点的挠率连续变化，（这相当于应变连续性条件，比位移连续、保证物质不重叠不开裂的要求更高）；图（b）表示逐渐分成两个反对称挠率的集团，分别保持不变的挠率，大小相等、方向相反，出现一个新的守恒条件；图（c）表两集团收缩为两个挠率面（界面），中间被一个恒挠率区（马氏体）隔开，此时马氏体区及两界面的挠率各自守恒；以后马氏体长大，界面形状变化，但界面的挠率仍然守恒。

因此，挠率张量不但是马氏体转变的一个本质性的描叙参数，而且也是相界面的一个本质性特征参数。一根位错线的本质参数是Burgers矢量，实际上也是一个位移矢量（位错线扫过后晶体两部分的相对位移），一个相界面的本质参数很可能应是一个二阶张量，例如挠率张量，它实质上是一个应变张量。如果把一维的点阵缺陷位错与二维的点阵缺陷界面互相映射，则相应的映射关系为：位移矢量相对于应变张量，Burgers矢量相对于曲率张量的互相映射。可以看出挠率张量对于相界面的重要性。

可以这样说，马氏体形核是一个由骚乱的点阵，即无规分布的挠率区，向较为规则排列的弹性畸变区，即正负对称分布的挠率区变化的过程，以后的长大过程，则是一个带有恒定挠率的相界面的推移过程。

1.5 预马氏体转变

预马氏体转变（Premartensitic transformation）或叫前驱效应（precursory effect）是指在马氏体转变发生以前，通常是在M_s点以上但接近M_s的温度范围内，体系中所发生的马氏体转变的预备过程。这些过程可能直接涉及形核，因而对这些过程的研究，有助于了解形核机理。近来这方面的研究极为活跃，在1989年举行的第六届国际马氏体转变会议上，有关前驱效应的论文，占有重要地位。现在观察到的前驱效应大致可分为3类，即

电镜形貌中的“闪烁”和“花呢（tweed）”状、电镜衍射下的附加斑点或斑点漫散、及中子或X射线衍射下测得的软模声子。

闪烁（flicker，或称摇曳）是在接近马氏体转变温度的试样中，电镜形貌中出现的局域“聚焦-不聚焦”的自动交替的变化，或衬度的起伏变化。J. Perkins等[81]在Cu-44.8%Mn-1.6%Al合金中观察到非常小的（～20nm）动态闪烁区域的分布。这种合金中“马氏体转变”是由面心立方点阵变为面心四方点阵。这种闪烁衬度效应被认为是母相中{110}的弹性位移、即四方性畸变，是一种预马氏体转变效应。

与闪烁相似的有Cornelis等[82]在Fe-6%Mn-1%C中观察到的“溪流”效应，他们的描述是：“呈现十字编织形的外观，其中〈100〉方向特别突出，图像连续闪烁，给人印象是沿〈100〉方向的某种流动”。他们把这看作是点阵失稳的表现，是马氏体转变的前驱效应。

花呢状形貌是一种有明显特征的十字虚线形应变衬度的电镜形貌，在有序无序转变、脱溶和马氏体转变的前驱过程中均被观察到。S. Muto等[83]在Fe-30%Pd(原子）合金中观察到这种花呢形貌，并测定了与之有关的弹性常数 $C'=\frac{1}{2}(C_{11}-C_{12})$ 的软化。此合金中的马氏体转变是由面心立方点阵到面心四方点阵，花呢形貌是由{110}〈101〉的原子切位移引起，是一种局域的四方性畸变，畸变区域的大小为4—8nm。他们认为这是一种静态的畸变，而不是动态的，其出现可以高于M_s，达20—30K。

上面讲到的Cu-Mn合金中的闪烁[81]，也与花呢形貌对应，后者出现在更早的时期，呈现花呢形貌的合金有Ni-Al，Au-Cd，Fe-Pt，Cu-Zn，In-Tl，Fe-Ni，Ni-Ti等[84]。很显然，闪烁和花呢是紧密有关的马氏体转变的前驱效应的两种表现。

Robertson和Wayman[84, 85]研究了Ni-Al，Cu-Zn及Cu-Zn-Al合金中的花呢形貌和衍射斑点的漫散，并作了详明的理论解释。基于黄昆漫散散射（Huang Diffuse Scattering）的理

论，他们算得上述合金中的花呢形貌是由静态的⟨110⟩⟨1$\bar{1}$0⟩点阵位移畸变引起，前面的⟨110⟩表原子位移方向（即波的振动方向，后面的⟨1$\bar{1}$0⟩表波矢方向，因而是一种静态横波。这种静态位移波的产生来源于点阵的软化，这对马氏体转变无疑是有促进作用的。

Moine，Michal和Sinclair[86, 87]在原子百分数为49.5%Ti的Ti-Ni合金中，观察到预马氏体转变的一种效应——出现附加衍射斑点，他们把这些斑点归因于“点阵位移波(lattice displacement wave)”，并认为有两种类型，一种是小质点，直径约为8nm，另一种为大质点，直径为20nm．前者为诸如$\frac{1}{2}$⟨110⟩⟨110⟩，$\frac{1}{2}$⟨110⟩⟨001⟩等横波，及$\frac{1}{2}$⟨111⟩⟨111⟩等纵波．这些作者们认为这些波与马氏体转变直接有关．大质点为$\frac{1}{3}$⟨110⟩⟨110⟩和$\frac{1}{2}$⟨100⟩⟨100⟩，与马氏体转变不直接有关。作者们把这些点阵位移波分为可公度的（commensurate），反公度的（anticommensurate），不可公度的(incommensurate）以及间断公度的（discommensurate），如图1.39所示，这些波可以在高分辨电镜下显示出来，并引起附加衍射斑点，同时也使一些本应在某些衍射图上出现的斑点消失。

此外，在前述的花呢形貌及闪烁形貌的同时，几乎都伴随有衍射斑点漫散、模糊的情况，显示晶面间的距离有了变化。

第三类前驱效应是用中子和x射线照射所呈现的软模声子．Shapiro[88]用弹性和非弹性的中子散射，研究了碱金属、过渡金属、及镍基合金中的前驱效应，发现在高于M_s数十度的温度范围，就出现软模声子，即点阵调幅和均匀畸变，从而导致马氏体转变．

以上的前驱效应研究，不但为马氏体转变过程提供许多具体细节，而且对形核理论提出了启发和检验．很明显，Olson-Cohen形核模型几乎不与任何前驱效应相联系，因该模型本身的位错层错结构，并不与较大范围的点阵位移有关．而中子或X线衍射所观

察到的软模声子，对Clapp的软模模型是有力的证实。总的看来，上述前驱效应，与本章建议的D形核理论完全相容，尤其是花呢形貌所显示的点阵的静态位移畸变，几乎是D模型的直接证明。当然，还需进一步研究这静态位移的晶面，是否正好是平面不变应变的不变面。动态的、低频的点阵位移波，也能与D形模型联系起来。此外，溪流状或闪烁，除可能与稀释的平面不变应变有关外，还可能与D模型中X域和Y偶的运动和收缩联系。Y偶就是一个平面弹性畸变波，X域可看作一个波包质点。总之，前驱效应的研究，将有助于鉴别和完善形核模型。

但是，也有一些学者，包括马氏体转变领域的权威Wayman在内[8]，并不认为上述前驱效应与马氏体转变直接有关。Wayman认为，这些现象可能是某种独立的过程，例如TiNi合金中的附加衍射，反应一种新的独立相变，被称为R转变，与马氏体转变没有关系。TiNi合金中加Fe，可以强化R转变、抑制马氏体转变，加入量达5%Fe，则不再发生马氏体转变。至于花呢形貌，可能是可逆马氏体转变的标志，而不是前驱效应。这方面的争论，有待于更多的实验事实来判断、解决。

1.6　评论和小结

马氏体转变的形核理论，既是材料科学中的一个重要问题，又是个十分困难的课题，具有很高的学术价值，又有巨大的实际意义。这个问题到目前为止还未得到很好的解决。现在主要有两种理论观点，即经典的缺陷形核理论和局域化软模形核理论，各有一定的理论依据，各有一定的实验证实，但也各有自己的不足和困难。形核模型越具体详尽，表现的不足之处也越明显和尖锐，模型越概括和一般化，所包含的缺陷也较为隐蔽。前者正是缺陷形核模型的情况，最为尖锐的问题是在惯习面问题上的不足。后者是软模形核模型的情况，模型不明晰完整，难以指出具体的不足之处所在，或许这本身就正是一个不足之处。目前大体上可以这

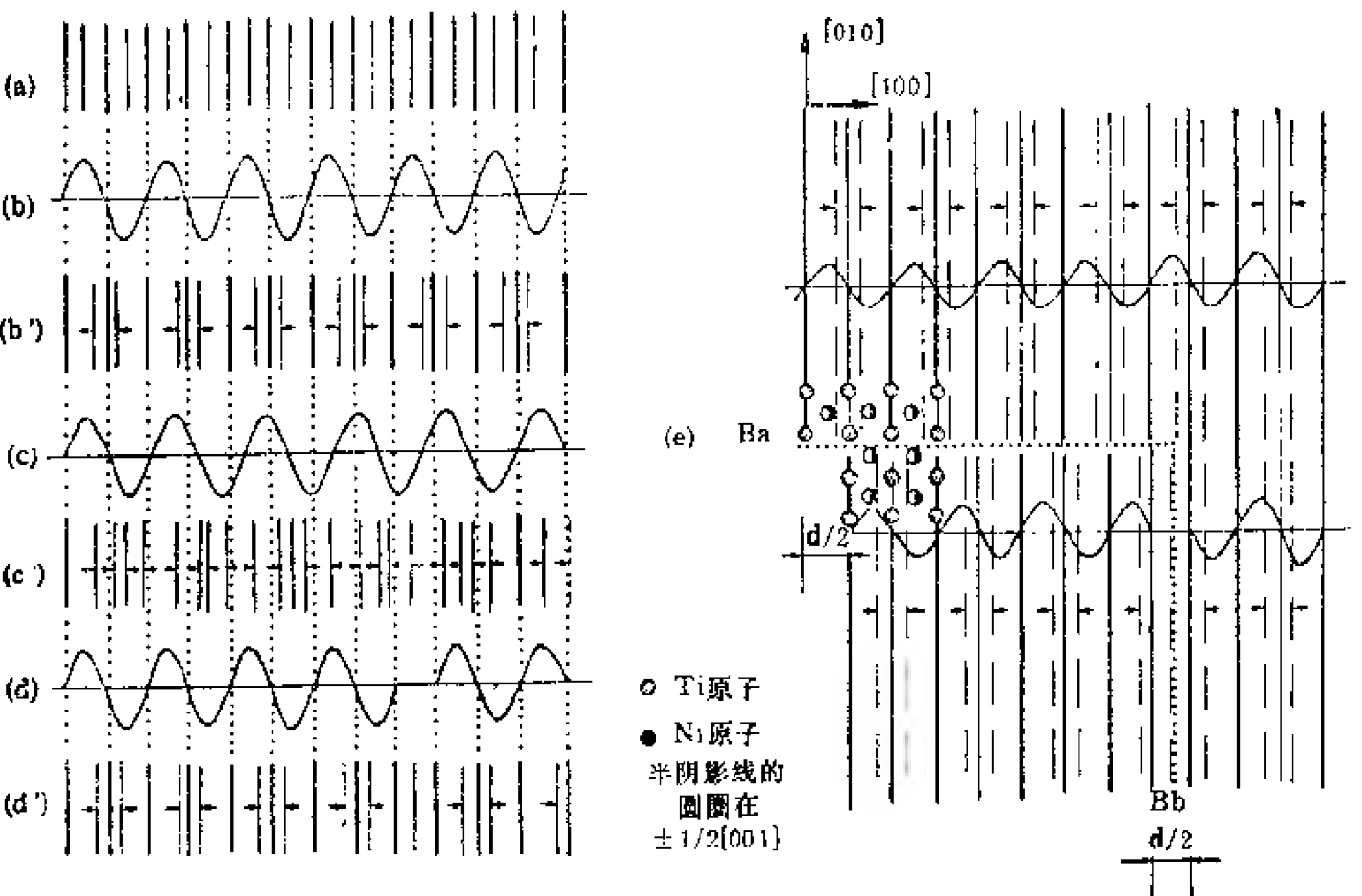


图 1.39 Ti-Ni合金中B_2结构的1/2〈100〉〈100〉点阵位移波示意图[86]

(a)完整晶体中的(200)面，交替地排列T面和N面

(b)公度的1/2〈100〉〈100〉点阵位移波，(b')相应的位移平面

(c)非公度的点阵位移波，(c')相应的位移平面

(d)被间断位移锁住的公度点阵位移波，(d')相应的位移平面

(e)反公度界面(Ba)和间断公度界面(Bb)

样就：对于Fe–C，Fe–Ni等铁基合金中的马氏体转变，较多的人趋向于赞同缺陷形核理论。对于有色合金如Cu–Zn，Au–Cd等的马氏体转变，较多的人趋向于赞同软模形核理论。从某种意义上说，这是在两难处境中不得不作出的一个选择。

本章中所建议的D形核理论，在很大程度上克服了上述两种模型的不足，对已有的实验结果（无扩散、取向、惯习、切变、等等）有较好的，协调一致的说明，对已有的理论，特别是马氏体转变的晶体学唯象理论，有十分紧密和相得益彰的关系。因而，或许可以说，D形核模型是一个较好的基点，有可能由此发展成一个较可接受、较少矛盾、较易证实的形核理论。这个模型的核心是：平面的不变应变是一种独特的应变，能在保持边界位移不变的情况下稀释。这不但可能是马氏体形核的基石，也可能是唯象理论的基石。至于本章提出的形核途径的设想，是完全可以进一步精确、完善、定量化、或大幅度修改的。这方面的工作正在进行之中。很可能，电脑模似形核过程是一个快速有效的手段，电镜、X射线、中子衍射、超声波、Auger谱等技术，可能提供更多的关于形核过程的实验结果，特别是预马氏体转变的研究，可能直接促进形核理论。或许现在已临近这样的时刻：马氏体转变的形核理论有一个飞跃的、甚至突破性的进展。

参 考 文 献

[1] M. Cohen, Fifty Years with Martensite—with G. V. Kurdjumov, Symposium on New Aspects of Martensitic Transformations, JIM, Kobe, Japan, 1976, pp.7—8.

[2] G. B. Olson and H. Hartman, Martensite and Life, Displacive Transformations as Biological Process, ICOMAT-82, Int. Conf. on Martensitic Transformations, Leuven, Belgium (ed. L. Delaey), 1982, pp.855—865.

[3] C. M. Wayman, The Growth of Martensite Since E. C. Bain (1924). Some Milestones, Proceedings of the 6th International Conference on Martensitic Transformation, held in Sydney, Australia, in July 1989, Guest Editor B. C. Muddle, Trans Tech Publications LTD, Switzerland, *Materials Science Forum*, 56

(1990) pp.1—32.

[4] G.B.Olson and M.Cohen, A General Mechanism of Martensitic Nucleation, *Metall. Trans.*, 7A(1976), pp. 1897—1904; and pp. 1905-1914; and pp.1915—1923.

[5] G.B.Olson and M.Cohen, Interphase-Boundary Dislocations and the Concepts of Coherency, *Acta metall.*, 27 (1979), pp. 1907—1918.

[6] G.B.Olson and M.Cohen, Theory of Martensite Nucleation, A Current Assessment, Proc.Int.Cong. Solid-Solid Phase Transformations (edited by H.I.Aaronson, D.E. Laughlin, R.F.Sekerka and C.M.Wayman), *Am.Inst. Min. Engrs*, New York, 1982, pp.1145—1164.

[7] M.Cohen, Nucleation of Solid-State Transformations, *Trans. metall. Soc. of AIME*, April 1958, pp.171—183.

[8] G.B.Olson and M. Cohen, A Perspective on Martensitic Nucleation, *Ann.Rev.Mater.Sci.*, 1981, pp.11, 1—30.

[9] M. Ahlers, The Martensitic Transformation, A Model, *Z.Metallkde*, 65 (1974), pp.636—642.

[10] M.Suezawa and H.E.Cook, On the Nucleation of Martensite, *Acta metall.*, 28 (1980), pp.423—432.

[11] I.-W. Chen and Y.-H.Chiao, Martensitic Nucleation in ZrO_2, *Acta metall.*, 31 (1983), pp.1627—1638.

[12] T.Suzuki, T. Mukaigaito and T. Hoshino, Dynamic Simulation of the Nucleation Process of the Martensite, Proceedings of the 6th International Conference on Martensitic Transformations, held in Sydney, Australia, in July 1989, Guest Editor B.C.Muddle, Trans Tech Publications LTD, Switzerland, *Materials Science Forum*, 56 (1990), pp.113—118.

[13] N.Nakanishi, Elastic Constants as They Relate to Lattice Properties and Martensite Formation, *Prog.Mater.Sci.*, 24 (1980), pp.143—265.

[14] N.Nakanishi, Y.Muvabami and S.Kachi, Pseudoelasticity and Elastic Anisotropy in the β Phase Thermoelastic Alloys, *Scripta metall.*, 5 (1971), pp.433—440.

[15] P.C.Clapp, A Localized Soft Mode Theory for Martensitic Transformations, *Physica status solodi (b)*, 57 (1973), pp.561—569.

[16] T.Suzuki and M.Wuttig, Analogy between Spinodal Decomposition and Martensitic Transformation, *Acta metall.*, 23 (1975), pp.1069—1076.

[17] A.H.Heuer and M.Ruhle, On the Nucleation of the Martensitic Transformation in Zirconia (ZrO_2), *Acta metall.*, 33(1985), pp. 2101—2112.

[18] S.K.Chan, Theory of the Energetics and Non-Classical Nucleation Martensitic Transformation from Partially Soft Modes, Proceed-

ings of the 6th International Conference on Martensitic Transformations, held in Sydney, Australia, in July 1989, Guest Editor B.C.Muddle, Trans Tech Publications LTD, Switzerland, *Materials Science Forum*, 56 (1990) pp.101—106.

[19] M.S.Wechsler, D.S.Lieberman and T.A.Read, On the Theory of the Formation of Martensite, *Trans.AIME*, 197 (1953), 1503—1515.

[20] D.S.Lieberman, M.S.Wechsler and T.A. Read, Cubic to Orthorhombic Diffusionless Phase Change-Experimentaland Theoretical Studies of AuCd, *J.Applied Physics*, 26 (1955), pp.473—484.

[21] J.S.Bowles and J.K.Mackenzie, The Crystallography of Martensite Transformations I, *Acta metall.*, 2 (1954), 3, pp.129—137. The Crystallography of Martensite Transformations III, *Acta metall.*, 2 (1954), 3, pp.225—234.

[22] J.K.Mackenzie and J.S. Bowles, The Crystallography of Martensite Transformacions II, *Acta metall.*, 2 (1954), 3, pp. 138—147.

[23] B.A.Bilby, R. Bullough and E.Smith, Continuous Distributions of Dislocations, A New Application of the Methods of non-Riemannian Geometry, *Proc.Roy.Soc.*, A231 (1955), pp.263—273.

[24] R.Bullough and B.A.Bilby, Continuous Distributions of Dislocations, Surface Dislocation and the Crystallography of Martensitic Transformations, *Proc. Phys. Soc.*, B69 (1956) pp.1276-1286.

[25] C.M.Wayman, Introduction to the Crystallography of Martensitic Transformations, The MacMillan Co.New York, 1964.

[26] L. Kaufman and M. Cohen, Thermodynamics and Kinetics of Martensitic Transformations, *Prog.Metall Phys.*, 7 (1958), pp. 165 -246.

[27] M. 科亨,(中译)谢希文校,"马氏体转变"讲座,材料科学与工程,1983,第3期,34-41页.

[28] L.Kaufman and M.Cohen, The Martensitic Transformation in the Iron-Nickel System, *Trans.AIME*, 206 (1956), pp.1393—2001.

[29] F.C.Frank, Martensite, *Acta metall.*, 1 (1953), pp.15—24.

[30] H.Knapp and U.Dehlinger, Mechanik und Kinetik der Diffusionslosen Martensitdildung, *Acta metall.*, 4(1956), pp.289-297.

[31] J.C.Fisher, J.H.Hollomon and D.Turnbull, Kinetics of the Austenite→Martensite Transformation, *Trans. AIME*, 185 (1949), pp. 691—700.

[32] Z.Nishiyami, Science Reports, Tokyo Imp. Univ.23 (1934), pp. 637—642.

[33] J.D. Eshelby, Elastic Field of an Ellipsoidal Inclusion, and Related Problems, *Proc.Roy.Soc.*, A241 (1957), pp.376—396.

[34] J.D.Eshelby, The Elastic Field Outside an Ellipsoidal Inclusion, *Proc.Roy.Soc.*, A252 (1959), pp.561—569.

[35] J.D. Eshelby, Elastic Inclusions and Inhomogeneities, *Prog. Solid Mech.*, 2 (1961), pp.87—139.

[36] A.J.Bogers and W.G.Burgers, Partial Dislocations on the{1 1 0} Planes in the B.C.C.Lattice and the Transition of the F.C.C. into the B.C.C.Lattice, *Acta metall.*, 12 (1964), pp.255—261.

[37] E.C.Bain, The Nature of Martensite, *Trans.AIME*, 70 (1924), pp.25—46.

[38] S.Dash and N.Brown, Nucleation and Growth of Martensite in Fe-32.3%Ni Alloy, *Acta metall.*, 14 (1966), pp.595—603.

[39] P.L.Ferraglio and K. Mukherjee, The Dynamics of Nucleation and Growth of a Thermoelastic Martensite in a Splat Quenched Cu-47.5 at.%Cd Alloy, *Acta metall.*, 22(1974), pp.835—845.

[40] H.E.Cook, A Lattice Model of Structural and Dislocation Transformation, *Acta metall.*, 21 (1973), pp.1431—1444.

[41] M.Suezawa and H.E.Cook, On the Streaming Phenomenon—I *Acta metall.*, 26 (1978), pp.1205—1213.

[42] M.Suezawa and H.E. Cook, On the Streaming Phenomenon—II *Acta metall.*, 26 (1978), pp.1665—1670.

[43] C.Zener, Elasticity and Anelasticity of Metalls, University of Chicago Press, 1948.

[44] W.D.Robertson, Physical Properties of Martensite and Bainite, Special Report 93, The Iron and Steel Institute, 1965, pp.26—29.

[45] E.S.Fisher and D.Dever, Relation of the C' Elastic Modulus to Stability of B.C.C.Transition Metals, *Acta metall.*, 18 (1970), pp.265—269.

[46] D. de Fontaine, Mechanical Instabilities in the B. C. C. Lattice and the Beta to Omega Phase Transformation, *Acta metall.*, 18 (1970), pp.275—279.

[47] G.Shirane and Y.Yamada, Lattice-Dynamic Study of the 110 K Phase Transition in $SrTiO_3$, *Phys.Rev.*, 177 (1969), pp.858—863.

[48] N.G.Pace and G.A.Saunders, Ultrasonic Study of Lattice Stability in Indium+Thallium Alloys, *Proc.R.Soc.*, A326 (1972), pp. 521—533.

[49] K.Salama and G.A.Alers, Elastic Moduli Variations at the Martensite Transformation of a Fe-Ni Alloy, *J. Appl. Phys.* 39 (1968), pp.4857—4859.

[50] G.Hausch and H.Warlimont, Single Crystalline Elastic Constants of Ferromagnetic Face Centered Cubic Fe-Ni Invar Alloys, *Acta metall.*, 21 (1973), pp.401—414.

[51] M.R.Madhava and G.A. Saunders, An Ultrasonic Study of the Elastic Phase Transition in In-Cd Alloys, *Phil.Mag.*, 36 (1977), pp.777—796.

[52] Y.Endoh and Y.Noda, Zero Sound Anomaly in a Ferromagnetic Invar Alloy $Fe_{65}Ni_{35}$, *J.Phys. Soc. Japan*, 46 (1979), pp.806—

814.
[53] R.J.Comstock, J. B.Cohen and H.R. Harrison, Pre-transition Phenomena in an Iron-Nickel Alloy, *Acta metall.*, 33 (1985), pp.423—436.
[54] W.Krauss, S.K.Pabi and H.Gleiter, On the Mechanism of Martensite Nucleation, *Acta metall.*, 37 (1989), pp.25—30.
[55] R.E.Cech and D.Turnbull,Heterogeneous Nucleation of the Martensite Transformation, *Trans.AIME*, 206 (1956),pp.124—132.
[56] C.L.Magee, The Kinetics of Martensite Formation in Small Particles, *Metall.Trans.*, 2 (1971), pp.2419—2430.
[57] C.H.Li., D.A.Porter and K.E.Esterling, A Lattice Resolution Study of the Martensitic Transformation of Small Iron Particles in a Copper Matrix, *Acta metall.*, 33(1985), pp.317—328.
[58] T.Suzuki, A.V.Granato and J.F.Thomas,Jr, Second-and Third-Order Elastic Constants of Alkali Metals, *Phys.Rev.*,175(1968), pp.766—781.
[59] M.Born, On the Stability of Crystal Lattices, *Proc. Cambridge Phil., Soc.*, 36 (1940),pp.160—172.
[60] F.Milstein,Theoretical Strength of a Perfect Crystal, *Phys.Rev.*, B3 (1971),pp.1130—1141.
[61] A.V.MacRae and L.M.Germar, Thermal Vibrations of Surface Atoms, *Phys.Rev.Letters*, 8 (1962),pp.489—490.
[62] D.P.Jackson, Surface Relaxation in Cubic Metals, *Canad. J. Phys.*, 49 (1971),pp.2093—2097.
[63] J.W.Christian, Martensitic Transformations, A Current Assessment,The Mechanism of Phase Transformations in Crystal Solids, The Institute of Metals,1969, pp.129—142.
[64] J.W.Christian, The Theory of Transformations in Metalls and Alloys, second editions, Pergamon Press, Oxford, New York, 1975.
[65] G.B.Olson, Mechanisms of First-Order Lattice-Distortive Transformation,Proceedings of the 6th International Conference on Martensitic Transformations, held in Sydney, Australia, in July 1989, Guest Editor B.C.Muddle, Trans Tech Publitions LTD, Switzerland, *Materials Science Forum*, 56 (1990),pp. 89—100.
[66] A.G.Khachaturyan, Theory of Structural Transformations in Solids, John Willey and Sons, New York, 1983.
[67] C.L.Magee,Nucleation of Martensite,Phase Transformations,ASM, 1970,pp.115—156.
[68] 邓永瑞，马氏体形核理论，稀有金属材料及工程，(1991),第1期，17—21页。
[69] 邓永瑞，马氏体形核的力学分析，稀有金属材料及工程，(1991)，第2期，9—13页。
[70] Y.Deng, Martensitic Transformation Theory, International Aca-

demic Publishers, Peijing, 1991, pp.1—45.

[71] T.A.Schroeder and C.M.Wayman, The Formation of Martensite and the Mechanism of the Shape Memory Effect in Single Crystals of Cu-Zn Alloys, *Acta metall.*, 25 (1977), pp.1375—1391.

[72] Smithells Metals Reference Book, 6th edition, (edited by Eric A. Brandes), Butterworth & Co., London, 1983, p.15.1.

[73] K.Otsuka, C.M. Wayman, K.Nakai, *et al.*, Superelasticity Effects and Atress-Induced Martensitic Trnasfomations in Cu-Al-Ni Alloys, *Acta metall.*, 24 (1976), pp.207—226.

[74] S.Chakravorty and C.M.Wayman, Electron Microscopy of Internally Faulted Cu-Zn-Al Martensite, *Acta metall.*, 25(1977), pp. 989—1000.

[75] R.J.Salzbrenner and M.Cohen, On the Thermodynamics of Thermoelastic Martensitic Transformations, *Acta metall.*, 27(1979), pp.739—748.

[76] Y.Deng and G.S.Ansell, Investigation of the Thermoelastic Martensitic Transformation in a Cu-Zn-Al Alloy, *Acta metall.*, 38 (1990), pp.69—76.

[77] 邓永瑞, G.S.Ansell, 热弹性马氏体长大, 金属学报, 26(1990), A382—384.

[78] K.M.Knowles and D.A.Smith, The Nature of the Parent- Martensite Interface in Titanium-Manganese, *Acta metall.*, 29(1981), pp.1445—1466.

[79] A.M.Kosevich, Dislocation in Solids, ed.F.R.N.Nabarro, North-Holland Co., Amsterdam, vol.1, 1979, pp.54—59.

[80] R.K.Pathria, Statistical Mechanics, Pergamon Press, Oxford, 1972.pp.55—157.

[81] J.Perkins, D.M.Farkas and T.Yamashita, Excitation of Lattice Reorientations in"Tweed"Copper-Manganese Alloys, Proceedings of the 6th International Conference on Martensitic Transformations, held in Sydney, Australia, in July 1989, Guest Editor B.C. Muddle, Trans Tech Publications LTD, Switzerland, *Materials Science Forum*, 56 (1990), pp. 51—56.

[82] L. Cornelis, R. Oshima, H. C. Tong and C. M. Wayman, Direct Observations of Pretransforamtion Lattice Instabilities, *Scri. Metall.*, 8 (1974), pp. 133—143.

[83] S. Muto, S. Takeda, R. Oshima, *et al.*, High-Resolution Electron Microscopy of Tweed Microstructurein Fe-Pd Alloys, Proceedings of the 6th International Conference on Martensitic Transformations, held in Sydney, Australia, in July 1989, Guest Editor B. C. Muddle, Trans Tech Publications LTD, Switzerland, *Materials Science Forum*, 56 (1990), pp.45—50.

[84] I.M.Robertson and C. M. Wayman, Tweed Microstructures III. Origin of the Tweed Contrast in β and γ Ni-Al Alloys, *Phil.*

Mag., A48 ([illegible]), pp.[illegible]29—[illegible]17.

[85] I.M.Robertson and C. M. Wayman, Modulated Microstructures in Copper-Zinc and Copper-Aluminum-Nickel, *Metall.Trans.*, 15A (1984), pp.269—276.

[86] P.Moine, G.M.Michal and R.Sinclair, A Morphological Study of "Premartensitic"Effects in TiNi, *Acta metall.*, 30 (1982),pp. 109—123.

[87] G.M.Michal, P.Moine and R.Sinclair, Characterization of the Lattice Displacement Waves in Premartensitic TiNi, *Acta metall.*, 30 (1982),pp.125—138.

[88] S.M.Shapiro, Neutron Scattering Studies of Premartensitic Phenomenon, Proceedings of the 6th International Conference on Martensitic Transformations, held in Sydney,Australia,in July 1989, Guest Editor B.C.Muddle, Trans Tech Publications LTD, Switzerland, *Materials Science Forum*, 56 (1990),pp.33—44.

第二章　马氏体转变动力学理论

2.1　引　　言

在研究相变的领域，动力学通常指转变量对温度和时间的依赖关系，因而可称为T-T-T（transformation-temperature-time）关系.图2.1示出一个典型的马氏体转变的T-T-T图[1]．但是，马氏体转变由于其巨大的转变速度，在许多情况下，时间因素已难以测定．因而，本书中马氏体转变的动力学，主要指转变量和温度之间的关系．许多马氏体转变是变温形成的，即对应于M_s点以下的某一温度的马氏体量，在体系达到该温度时，几乎立即形成，不再出现时间因子．本章只限于讨论热弹性马氏体在变温转变过程中的马氏体量Ω和温度T之间的关系．热弹性马氏体转变较多地出现在有色合金系统中，经适当淬火后，在冷却过程中马氏体长大、增多、直至转变完成，在加热过程中马氏体缩小、减少、直至全部消失，恢复百分之百的母相结构．这种热弹性可逆过程，可以反复进行，是形状记忆效应的基础，在科学技术中十分重要．

对于热弹性马氏体转变的动力学，不少研究者作了一定的理论处理，希望纳入一个较严格的、最好是定量的系统．在一段时间内，Landau理论[2]被看作是极有希望的一个基础．Landau理论在处理二级相变方面非常成功，如铁磁、铁电转变．为了把这一理论扩展至一级相变，Devonshire[3~5]建立了一个6次多项式作为系统的自由能函数，从而显示出一级转变的某些特征．这些理论的重要成果之一，是自然地导出转变的热滞现象，这是热弹性马氏体转变的根本特征之一．从理论上导出这个热滞，可以来

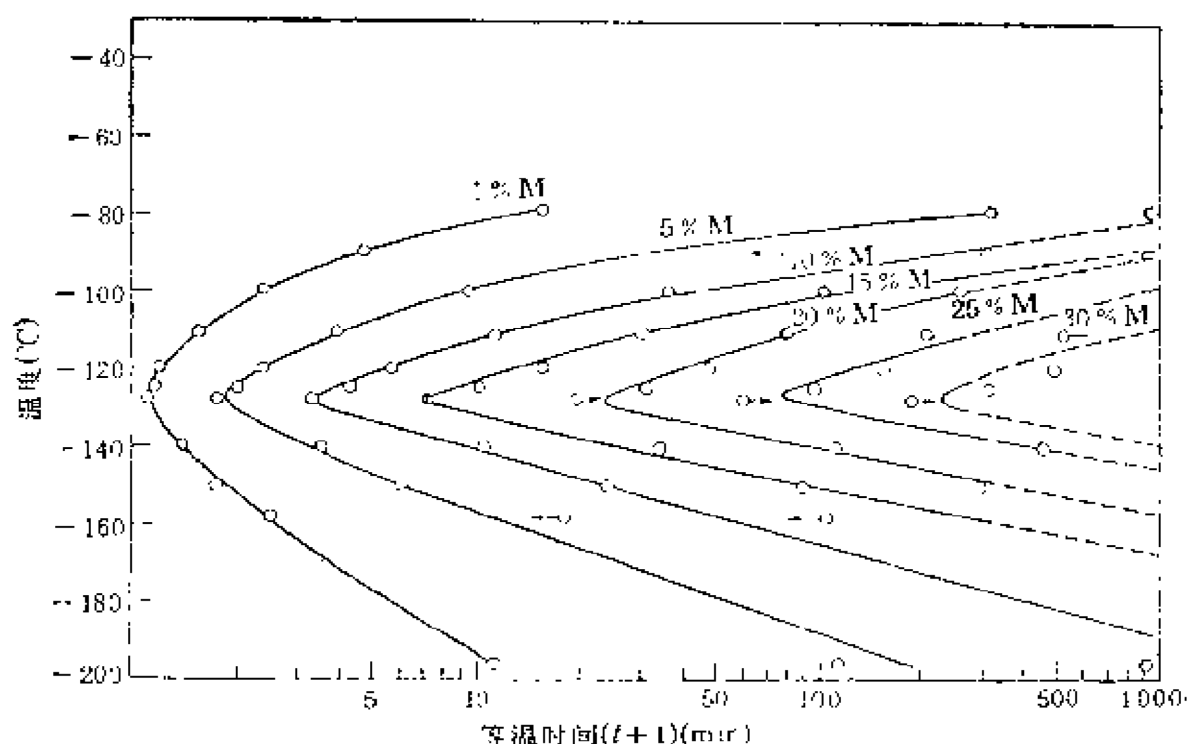


图 2.1 Fe–Ni–Mn合金马氏体转变的T–T–T（动力学）曲线[5]

源于外场作用(Landau)，也可以来源于温度升降(Devonshire)。这一成功自然引起了一些理论材料学家的注意，因而在这方面作了大量的开拓工作，企图建立一个马氏体转变的动力学唯象理论。

一级相变与二级相变的一个重要不同之处在于：前者存在新相与母相的界面，而后者没有。为了处理相界面，Landau理论被发展为Ginzburg–Landau理论[6]，即在自由能函数中引入一个微分导数项，与界面能相联系。对于马氏体转变，也有不少人力图建立Landau型的理论[7–11]。但近来这方面的热情有所减退，可能的原因是碰到了以下这些困难：①马氏体转变的序参量是什么？②体系的自由能函数应表为什么形式？③如何计入相界面的影响？此外，还有一个也许是更为根本的情况要考虑，现在越来越明显，对于二级或二级以上相变，愈是在接近临界点处，Landau 理论的误差愈大，而应代之以 Wilson 的重正化群理论[12–14]，才能得到正确的解释和结果。换言之，甚至对二级相

变，Landau理论这种平均场理论已被证明为无效，那么，对原来就没能建立Landau型理论的一级相变，自然更必须充分考虑这一转变本身所固有的特点。

本章将建议一个新的热弹性马氏体转变的动力学理论，以如下几点考虑为出发点：①转变的序参量就简单地取作马氏体转变的百分数；②体系的自由能函数是一个简单的二次多项式；③相界面对转变的影响不包含在自由能函数之中，因为界面的摩擦不是一个可逆平衡过程，不可能用平衡态热力学函数，如自由能，来作出描述，而必须引入另外一个不可逆过程热力学函数——摩擦函数——来定量地描述。体系的自由能函数和摩擦函数，可以联合成为动力函数，来描述热弹性马氏体转变的动力学，以得到统一的理论处理。

本章将先介绍Landau理论，Falk [7,8] 和Olson-Cohen [9] 建立马氏体转变唯象理论的努力，然后介绍笔者及其合作者对这一问题的理论处理。

2.2 Landau理论和马氏体转变

2.2.1 Landau理论和Devonshire理论

对于二级相变，Landau 理论 [2] 可通过两个步骤建立。第一步是找到一个标志相变过程的序参量ζ。确定序参量需要对此转变有深入的研究，以确定这一个系统内部的变量。相变与相应序参量的例子如：铁磁转变——磁化强度 [15]，铁电转变——极化强度 [16]，液态汽态转变——密度 [17]，有序无序转变——长程有序度 [18]，等。对于结构转变，曾把位移和旋转选作序参量 [15]。

第二步是建立一个系统的自由能（密度）函数，以温度T和序参量ζ为自变量

$$F(\zeta,T)=F_0+A\zeta+B\zeta^2+C\zeta^3+D\zeta^4+\cdots, \qquad (2.1)$$

其中的系数为温度T的解析函数。令T_C表临界点，当$T>T_c$，$\zeta=0$。为了得到二级转变，令

$$A=0 \tag{2.2}$$

$$B=b(T-T_C),\ b=常数>0 \tag{2.3}$$

$$C=0 \tag{2.4}$$

$$D=常数>0 \tag{2.5}$$

于是

$$F(\zeta,T)=F_0(T)+b(T-T_C)\zeta^2+D\zeta^4 \tag{2.6}$$

当有外场σ的作用时，自由能函数为

$$F(\zeta,T,\sigma)=F(\zeta,T)-\sigma\zeta \tag{2.7}$$

上面（2.6）和（2.7）式示于图2.2中，显示出转变曲线。此转变的全部热力学函数，均可由（2.6）式和（2.7）式算出。

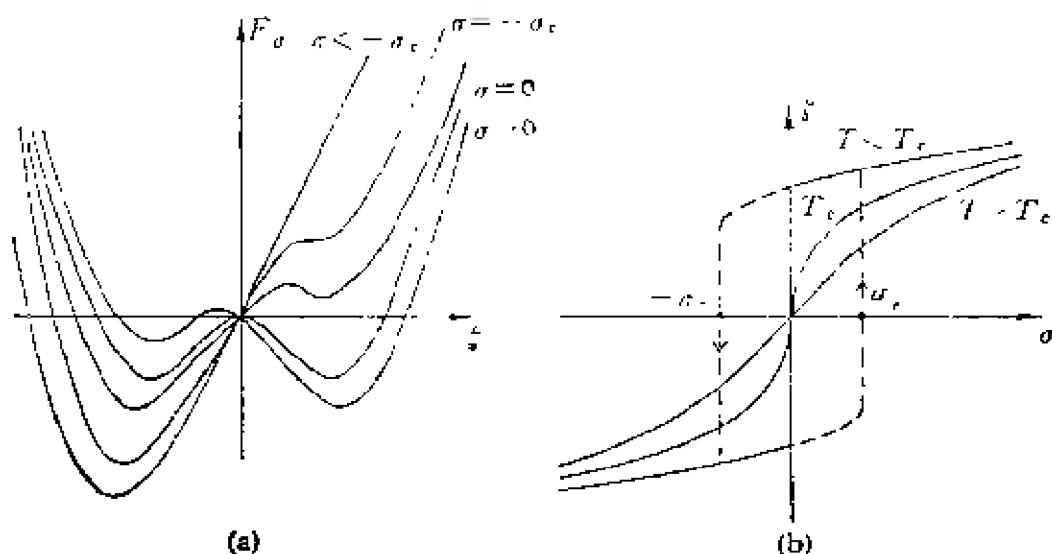


图 2.2 Landau理论[3]

(a) 不同外场作用下，自由能与序参量的函数关系，$T<T$

(b) 不同外场作用下，序参量的平衡值

为了导出一级相变，Devonshire[3-5]引入了如下的自由能函数

$$F(\zeta,T)=F_0(T)+A(T)\zeta^2-B\zeta^4+C\zeta^6 \tag{2.8}$$

这一自由能显示出一个热滞，如图2.3所示。为了计入相界面的

影响，Ginzburg-Landau自由能函数[6]由下式构成

$$F(\zeta,\nabla\zeta,T)=F(\zeta,T)+\alpha(\nabla\zeta)^2 \tag{2.9}$$

其中α为一正常数。平衡态由下式的极小值得到

$$F_{tot}=\int F(\zeta(x),\ \nabla\zeta(x),\ T)\ dv \tag{2.10}$$

其中x是位置坐标。这是一个泛函，故需用变分法求解。

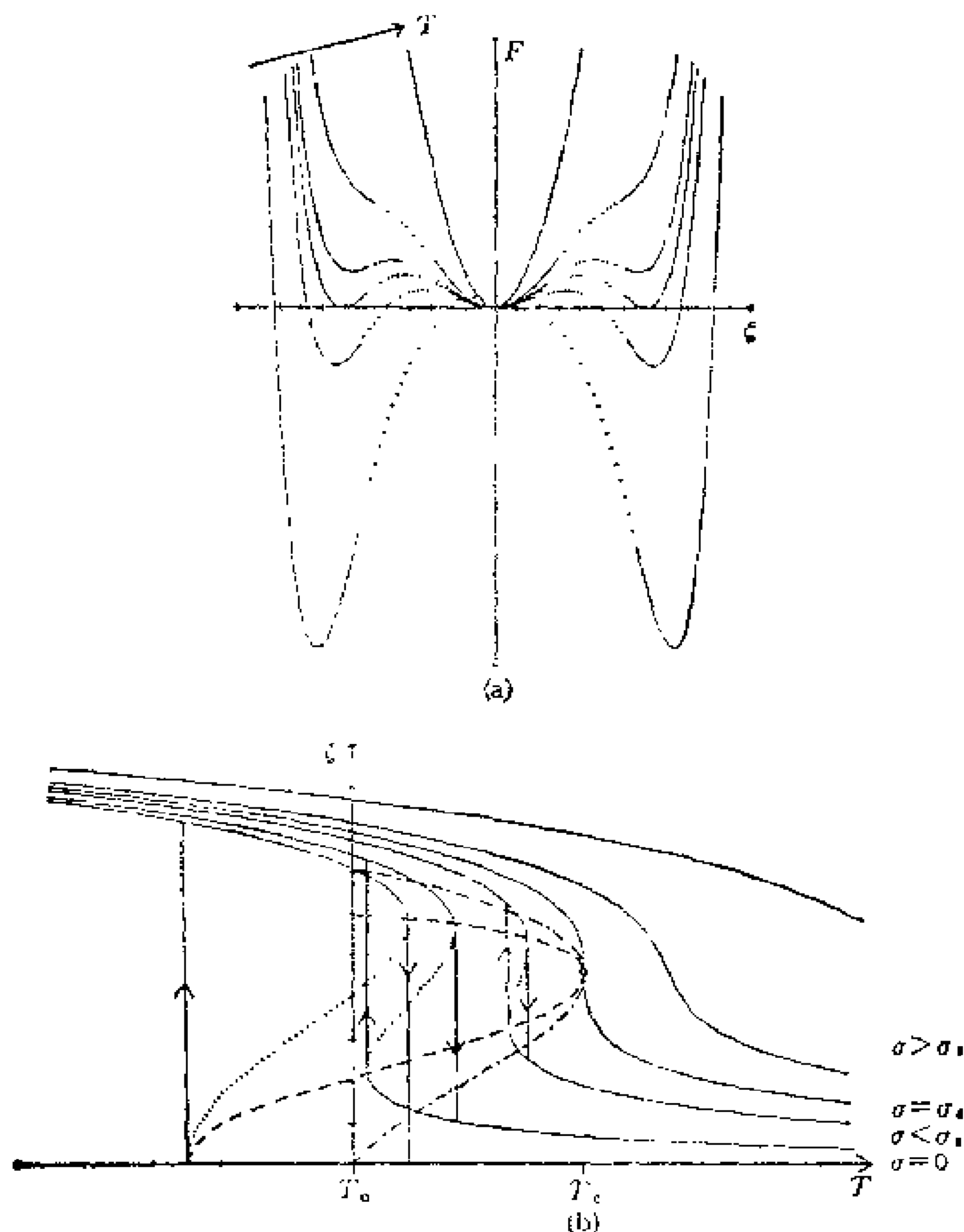


图 2.8 Devonshi e理论[5]

(a) 不同温度下，自由能与序参量的函数关系

(b) 不同温度下，序参量的平衡值

2.2.2 Falk和Olson-Cohen的处理

Falk[8]认为，热弹性马氏体转变所引起的形状记忆效应可用一维模型描述。把晶体看作由平行于惯习面的原子面堆叠而成，把这种面上的切应变τ取作序参量，则下面的自由能密度函数证明与实验一致[19]，

$$F_1(\tau,T)=\tau^6-\tau^4+(T+1/4)\tau^2 \quad (2.11)$$

如果把不同位向的马氏体片之间的界面，以及马氏体和母相之间的界面考虑进去，则自由函数密度为

$$F(\tau,\tau',T)=F_1(\tau,T)+(\tau')^2 \quad (2.12)$$

这一函数在不同条件下给出不同的解。例如对于无限大的晶体，这一函数给出4组解，如图2.4所示。

Olson和 Cohen[9]建议一种对马氏体转变的经典机理和非经典机理的统一处理方法。所谓经典机理指马氏体核具有明确固定的原子结构，然后马氏体核长大。非经典机理指晶核的结构不

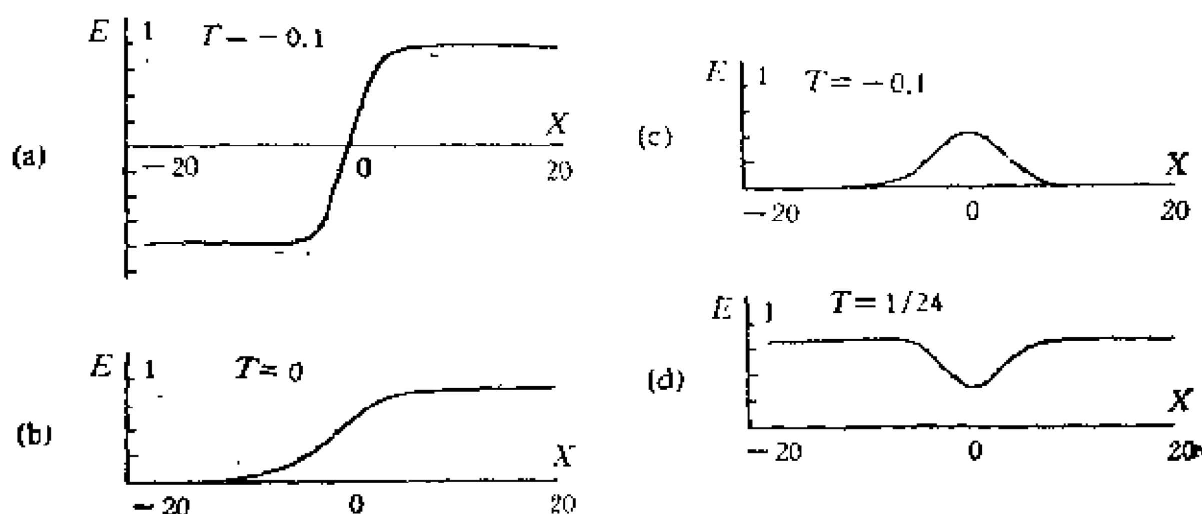


图 2.4 Falk 的处理[7]
(a) 无限晶体中马氏体-马氏体间的弯折点
(b) 无限晶体中母相-马氏体间的弯折点
(c) 母相中的孤波
(d) 马氏体中的孤波

断变化，可能还有一个漫散而不明锐的界面。笔者认为，后者近于上章介绍的软模形核过程。这两种机理的转变途径示于图2.5，其中η为"结构参数"（structural parameter）。系统的自由能变化ΔG被表为4次Landau型函数

$$\Delta G = A\eta^2 - B\eta^3 + C\eta^4 \qquad (2.13)$$

其中 A，B 和 C 分别与母相的2级，3级和4级弹性常数有关。η作为表示转变程度的结构参数，在百分之百母相时为零，在百分之

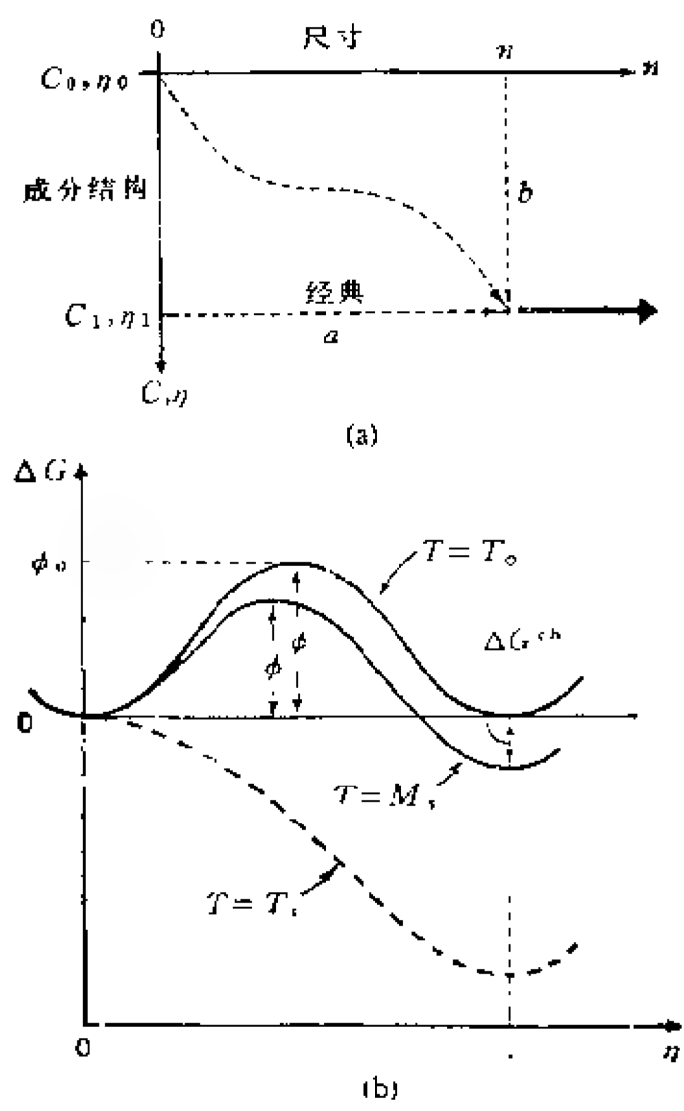


图 2.5 Olson-Cohen的处理[9]

(a) 一级相变的经典和非经典的途径

(b) 自由能随温度T和结构η的变化

η：结构，c：成分，n：尺寸

百马氏体时为1. 笔者认为，结构参数的物理意义并不明白、直观。在结构处于母相与马氏体之间的中间状态时，η 的值难于确定。对于界面的作用，Olson-Cohen 的处理类似于 Ginzburg-Landau理论，把界面假设为一个具有结构参数梯度∇η的层，因而总的自由能被假定为一个泛函，具有以下形式

$$G_{tot}=\int[\Delta G-k(\nabla\eta)^2]dv \tag{2.14}$$

其中k是梯度能系数。这个式子被认为适用于共格界面，可用来估计界面厚度；被认为提供了一个既可适用于马氏体的经典形核、又可用于非经典形核的、估计形核能量的基础[9]。

2.2.3 D(x)张量和序参量

从上面的描叙中，可以看出，有些概念与上章的D形核模型的一些概念相似。首先，Falk[8]是用平行于惯习面的晶面的堆垛来构造晶体，这与D形核中用不变面（惯习面）来构造晶体相同。Falk用这种面上的切变量作为参量，而D模型中是用平面不变应变张量D(r)来描述马氏体形核区、核本身、两相之间的过渡区及相界面。张量D(r)包含不变面上的切应变分量，而且后者是前者的主要部分。

其次，如果把平面不变应变张量D(r)看作Olson-Cohen处理中的结构参数η，则D形核模型中的约化应变Δ(r)相当于在Olson-Cohen 处理中描述相界面的结构参数梯度 ∇η，而Δ(r)正是在D模型中描述两相过渡区的位移梯度的。因而，D模型与Olson-Cohen处理的相似之处是很明显的。但是，两者的不同之处更为明显。D(r)和Δ(r)是平面不变应变张量，物理意义是明确的，定量计算是简易的，而且这两个张量只用来描叙马氏体形核过程，而不描述马氏体转变的动力学。因为形成马氏体核以后，这两个张量变成一个常数张量D，即晶体学唯象理论所确定的平面不变应变。张量D与热弹性马氏体的热滞现象密切相关（见第三章），而不是与马氏体转变量有关。此外，Olson-Cohen处理中的(2.14)式，既不便于处理形核过程的能量学，又不便于处理转变过程的

动力学，似乎是不甚具有实际意义。

尽管D(r)与Δ(r)与Falk和Olson-Cohen的理论中序参量有相似之处，但本章中用于描述马氏体转变动力学的，将是另一个简单得多的参量，马氏体转变的百分数Ω。

2.3 动力学理论的基本考虑

在本章的以下部分，将建议一个转变动力学的唯象理论，来描述热弹性马氏体转变。这一理论的目的是要显示动力学行为，并导出热弹性马氏体转变的可逆性、热滞及转变回线，这就是前言后所列出的特征。

热弹性马氏体转变有两个基本特点：可逆性和热滞。在这里，可逆性仅指转变可以向两个方向进行，即马氏体转变及其逆转变，取决于条件（温度，外力等）的变化。但这两个方向的转变并不在同一条途径上，也即是说存在着一个来源于相界面摩擦的热滞。因而，一个完整的马氏体转变和逆转变的周期，是由实验测得的转变回线描叙。按照理想化的程度，图2.6示出不同的转变类型：(a) 是完全理想化的情况，表为SA，这种转变的进行既无相界面引起的摩擦，又无因应变引起的弹性能；(b) 也是一种理想情况，表为SB，转变没有摩擦，而相变的弹性能与转变量成线性关系；(c) 是一种接近理想的情况，SC，有摩擦但没有弹性能；(d) 是一种真实情况，表为SD，存在摩擦和与马氏体百分数成线性关系的弹性能。(e) 是最一般的情况，表为SE，存在摩擦和非线性的弹性能。SA和SB似不可能在实验中实现，SC和SD的情况有可能在精心设计和细心进行的实验中得到，如文献[20，21]。SE较易用电阻、膨胀和金相方法得到，不仅在合金中[22-29]，而且在陶瓷中[30,31]。

SA是一个可逆热力学的平衡过程，很容易作理论处理。SB显示出简单的物理意义，这是一个相转变驱动力（两相的化学自由能差）与马氏体转变引起的线性弹性能之间的平衡。这也是一

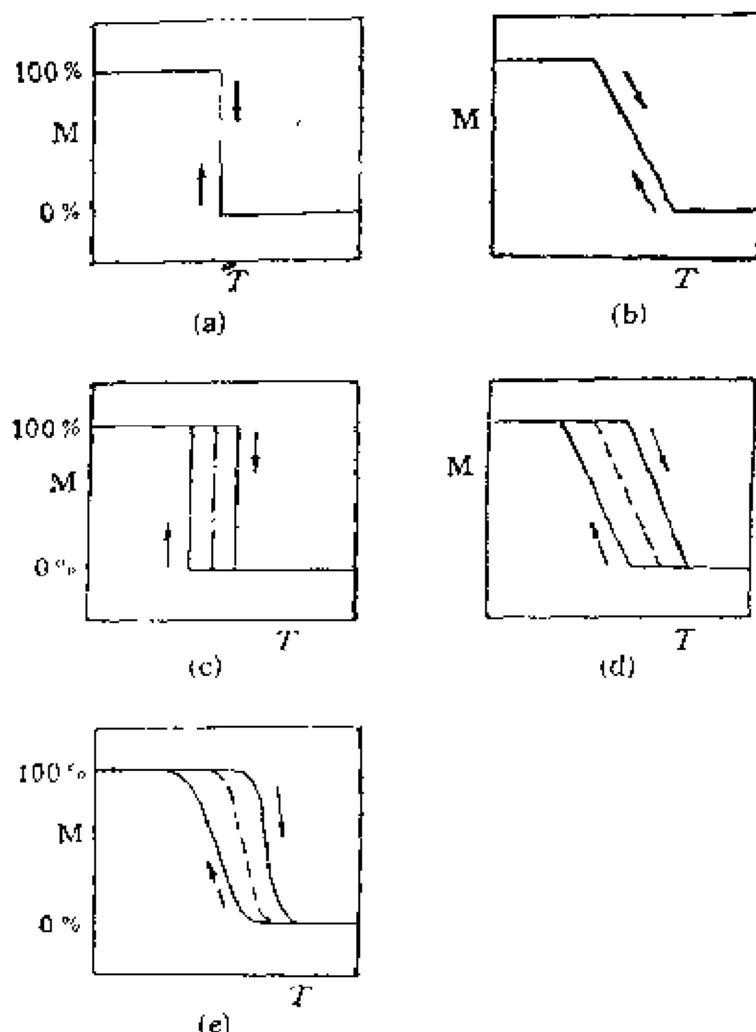


图 2.6 热弹性马氏体转变的类型[28]

(a) 没有界面摩擦，没有弹性能

(b) 没有界面摩擦，有线性弹性能

(c) 有界面摩擦，没有弹性能

(d) (e) 有界面摩擦，有非线性弹性能

个可逆热力学的平衡过程，可以用含有化学自由能差和线性弹性能的自由能函数描述，下一节将要谈到。SC 涉及到界面推移的摩擦，不可能是一个可逆热力学的平衡过程。不可能也不应该只用可逆热力学函数来描述。因此，在引入自由能函数的同时，将引入一个不可逆热力学函数——摩擦函数——共同描述 SC、SD 和SE。SD的自由能函数含有化学自由能和线性弹性能，而SE的自由能含有非线性弹性能，对后者的理论处理，与其说是材料科

学的课题，不如说是弹性力学的课题。

对于热弹性马氏体转变，区分以下三种状态是非常重要的。（1）可逆热力学的平衡态，这是指体系处于自由能最低的状态。若用F表示Gibbs或Helmholtz自由能，则

$$\frac{\partial F}{\partial x}=0 \tag{2.15}$$

其中x是一个温度和压力以外的热力学状态函数。（2）热力学静态，这指体系的所有热力学状态函数不随时间变化的状态。在这种状态下，体系的自由能可能不是最低值，但体系状态保持不变，因为存在着某些阻力，例如摩擦，阻止状态的任何变化，即

$$\frac{\partial F}{\partial x}<f_r \tag{2.16}$$

其中f_r是阻止状态变化的阻力。（3）转变状态，指热弹性马氏体转变缓慢地、稳定地进行，即

$$\frac{\partial F}{\partial x}=f_r \tag{2.17}$$

术语"热弹性平衡态"可以指上述三态中的任何一种状态，而决不等同于可逆热力学的平衡态。可以看出，热弹性平衡态不是一个精确的概念，除非另加说明。

对于一个马氏体转变，由于存在相界面的摩擦，其动力学不可能仅用作为可逆热力学函数的自由能函数或泛函来描述，而同时需要一个不可逆热力学函数。这一点是本书的观点与现行理论观点之间的重大区别。为了建立一个动力学的唯象理论，将在下节引入一个自由能函数，2.5节引入一个摩擦函数，这两种函数的结合就得到动力学函数，将在2.6节讨论。本章的最后一节将给出几个应用所建议理论的例子。

2.4 自由能函数

2.4.1 序参量和马氏体百分数

为了建立一个体系的自由能函数，第一步是选择一个适当的序参量。这种选择对一级相变和二级相变完全不同。对于二级相变，序参量表征转变的程度，并且几乎到处具有相同的值，或许只有接近界面的微小区域是例外。但是，对于一级相变，体系明显地分为两个部分，母相区和生成相区，其间被明锐的界面分开。在母相区，序参量为零，在生成相区，序参量为百分之百。而且界面具有一定结构，不随转变程度而变化。转变的程度可以很好地用母相区和生成相区的比值描述，也即转变的百分数是一个极好的序参量。当然，这个参量与二级相变中的序参量的意义完全不同，不表征结构的变化，而只是表示转变的程度，并作为自由能函数的自变量使用。在本书中，将采用马氏体百分数作为自由能函数的自变量，并且，由于在许多有热弹性马氏体转变的合金中，体积百分数与重量百分数相差不大，将不加区分，用 Ω 表示。

Falk[7,8]和一些研究者用切应变作为马氏体转变的序参量，并获得了相应的结果。但对于动力学来说，这种处理有一定局限性，因为对于整个体系所使用的切应变，只能是平均值。而这显然是没有意义的，因为相变的切应变本身实际是局域的和短程的。如果切应变是在正进行转变的区域测得（姑且不论是否现实可能），则此切应变不能与转变动力学相联系，因为此切应变是局域的而动力学是整个体系的。此外，如果不计界面，切应变只有两个分立的值，即对应于母相的零值与对应于马氏体的某定值。处于其间的切应变值，很容易与弹性能相联系，但难于与某些状态函数如化学自由能直接联系。在上章中提到的Clapp软模形核理论，把体系自由能看作应变的函数，只是为了显示应变对自由能的影响，对点阵稳定性的影响，而与化学自由能无关。

Olson和Cohen[9]使用结构参数，η，作为序参量，其优点是η很容易与化学自由能联系起来，η的梯度很容易与界面联系起来，从而得到了一些有用的结果，例如估计了相界面的厚度。但是，用这种序参量作为自由能函数的自变量，也有与Falk处理中用切应变作自变量同样的困难，此外，除了两个值，0和1，以外，结构参数η不具有明确的物理意义。至于（2.14）式，其中含有太多的未知因子，η，$\nabla\eta$和积分变量均需设定，相对而言，所能得到的、能被实验证实的结果太少了。

基于这一分析，本章中所建议的自由能函数将以马氏体百分数作为自变量。这一参数并不是一个真正的"序"参量，因而这个自由能函数也不是真正的、Landau型自由能函数。这是本章的观点与现在流行的理论观点的第一个不同点。尽管如此，本章的自由能函数确实可以直接描叙马氏体转变的动力学，并且各量均具有明确的物理意义。而且，从这一自由能函数得出的结果均可与实验直接比较。相界面的影响，将不是通过序参量的梯度，而是通过另一个函数来描述，即摩擦函数。这是本章观点与流行的观点的第二个不同之处。自由能函数的形式将在下节表出。

2.4.2 自由能函数和平衡态

由图2.6(a)和(b)可以看出，马氏体百分数和温度为线性关系，因而，自由能函数必为二次多项式

$$F_s = a + b\Omega + c\Omega^2 \tag{2.18}$$

如果这一体系处于外应力场σ作用下，则

$$F_s = a + b\Omega + c\Omega^2 + e\sigma\Omega \tag{2.19}$$

其中a, b, c和e对马氏体百分数Ω为常数，但可能是温度T的解析函数。对于SA和SB的可逆平衡态，自由能的极小值完全决定了转变过程

$$\frac{\partial F_s}{\partial \Omega} = L_o = 0 \tag{2.20}$$

这一条件确定了Ω和T之间的线性关系，只需a, b, c和e是T的线性

函数或常数，即

$$L_o = \Omega + jT + k + (uT + v)\sigma = 0 \qquad (2.21)$$

其中j，k，u和v为常数。当$\sigma = 0$可得

$$L_o = \Omega + jT + k = 0 \qquad (2.22)$$

可以看出，自由能函数的形式非常简单，只能导出 Ω和 T之间的可逆热力学关系，这正是理想状态下的热弹性马氏体转变的动力学。按照Kaufman和Cohen 的理论[32]，马氏体转变的自由能变化是

$$\Delta G = G_{ch} + G_{el} + G_{in} \qquad (2.23)$$

其中G_{ch}是化学自由能变化，G_{el}是弹性能变化，G_{in}是界面能。与(2.17) 式比较,则无量纲的自由能函数,F_s，可表示于国际单位制SI中，记作F_n。有关的例子将在2.7节中讨论。总之，正如预期的那样，这一自由能函数不能导出转变的热滞。从本质来讲，热滞是不可逆过程行为，不应该用平衡热力学函数描述。为此，在下节将引入一个描述不可逆行为的函数——摩擦函数。

2.5 摩擦函数

2.5.1 转变状态方程

许多研究者认为，马氏体转变的热滞来源于相界面推移过程中的摩擦[23, 33-36]，但对这种摩擦的实质尚缺乏了解，本书将在下章详加讨论。笔者的观点是，这种界面摩擦在下述意义上与普通的宏观滑动摩擦相类似：两者都是不可逆热力学过程，都是消耗能量并全部转化为不可逆的热损失。很明显，这种过程不可能单独用可逆热力学状态函数来描叙，还需要非状态函数的热力学函数来描叙，例如体系或外界所作的功。本章假定，存在一个摩擦力阻碍界面向两个方向，即正方向（马氏体转变）和反方向（逆转变），的推移，这就是热滞或图2.6(c)至(e)的行为的原因。换言之，摩擦把图2.6(a)，(b)中的热力学平衡转变路径直线劈裂为左右分开的两条线，从而形成一个转变回线。摩擦力f_t的性质将

在下一章讨论，这一章先作定量处理。为此，先引入转变状态方程。

如前面指出过，热弹性马氏体转变不是可逆热力学平衡态，而只是一种热弹性平衡态。描叙这种状态的方程称为转变状态方程，简称状态方程。如图2.6(c)—(e)所示，冷却过程可描述为

$$L_c=0 \tag{2.24}$$

加热过程可描述为

$$L_h=0 \tag{2.25}$$

它们在图2.6(c)和(d)中为直线，而在(e)中不是直线。这两个方程可由摩擦力f_r作用于自由能函数而得，并从而可以引入摩擦函数。

2.5.2 摩擦力和摩擦函数

摩擦函数F_r描述推移界面、克服界面摩擦所需的能量，或所作的功。驱动马氏体转变或推动界面移动的力，f_d，可以写作

$$f_d=-\frac{\partial F_n}{\partial \Omega} \tag{2.26}$$

其中Ω表马氏体百分数。抵抗界面移动的阻力为摩擦力f_r，可写作

$$f_r=-\frac{\partial F_r}{\partial \Omega} \tag{2.27}$$

当$f_d<f_r$，体系处于静态；当$f_d \gg f_r$，转变将以非热弹性马氏体转变的方式进行；当$f_d=f_r$或$f_d=-f_r$，体系处于转变态，于是，（2.27）式确定了摩擦函数。

状态方程以如下方式把F_r与F_d联系起来：马氏体转变的状态方程（2.24）等价于条件$f_d=f_r$，于是

$$L_c=-\frac{\partial F_n}{\partial \Omega}-\frac{\partial F_r}{\partial \Omega}=0 \tag{2.28}$$

而逆转变的状态方程（2.25）等价于条件$f_d=-f_r$，于是

$$L_h = \frac{\partial F_n}{\partial \Omega} + \frac{\partial F_r}{\partial \Omega} = 0 \tag{2.29}$$

因而

$$\frac{\partial F_n}{\partial \Omega} = \frac{1}{2}(L_c + L_h) = 0 \tag{2.30}$$

和

$$\frac{\partial F_r}{\partial \Omega} = \frac{1}{2}(L_c - L_h) = 0 \tag{2.31}$$

状态函数很容易由实验的转变回线得到，因而自由能函数F_n和摩擦函数F_r可分别由（2.30）和（2.31）式得到。

2.5.3 摩擦准焓和摩擦准熵

从（2.31）式获得的摩擦函数可以分解为两个部分：正比于温度的部分和与温度无关的部分，从而可表为

$$F_r = H_r - TS_r \tag{2.32}$$

其中H_r和S_r与温度无关。由(2.27)—(2.31)式可以看出，F_r具有与自由能一样的单位。因此，把F_r和自由能比较，可知H_r和S_r分别具有焓和熵的单位。然而，H_r，S_r和F_r都不是可逆平衡态的热力学函数，因此，本书将把H_r称为摩擦准焓，把S_r称为摩擦准熵。这两个函数在热弹性马氏体转变中起着十分重要的作用，它们有明确的物理意义和深刻的理论意义，不仅与动力学有关，而且与晶体学和转变机理有关。

摩擦准焓H_r直接与转变回线的宽度相联系，而摩擦准熵S_r则与转变回线的冷却段和加热段的斜率差有关。H_r和S_r一起描述了热弹性马氏体转变的热滞。在此，H_r和S_r是由实验的转变回线得到的，在下一章中，将在一个理论基点上导出这两个函数。

在上面的讨论中，隐含了一个假设：两个方向的摩擦力大小相等，也就是说，界面移向马氏体方向（正向）和移向母相的方向（反向）的摩擦阻力大小相等、方向相反。这就必然导至热力学平衡态处于（冷却和加热）两转变态的正中间。考虑到两相的

结构的不同和位能的差异，这两个方向的摩擦力大小很可能是不同的。假设果然如此，则转变态就不会等距离地分布在平衡态的两边。这种情况以后还要提到。但是，为了简单起见，作为初级近似，采用正反方向相等的摩擦，更易于示显出马氏体转变动力学的主要特点。在本书中，除非另有说明，将一直采用这一假定。

2.6 动力函数

2.6.1 动力函数的极小值和极大值

动力函数不是引入的新函数，而是把自由能函数和摩擦函数联合而成的、一个能描述马氏体转变动力学的统一的函数。由于含有摩擦函数在内，动力函数不是可逆热力学函数，而是不可逆热力学函数。用动力函数描述热弹性马氏体转变，较之于用自由能函数和摩擦函数来描述，更类似于Landau对二级相变的处理。并且，动力函数还会显示在一些另两函数不能显示的特点。动力函数的形式被设定为

$$F_d = A + B\Omega + C\Omega^2 + D\Omega^3 + \Omega^4 \qquad (2.33)$$

其中A，B，C和D对Ω为常数，但可以是温度的函数。预期（实际是设定）动力函数的极小值表转变状态，即

$$L_1 = 0, \quad L_2 = 0 \qquad (2.34)$$

且

$$\frac{\partial F_d}{\partial \Omega} = L_1 \ L_2 \ L_3 \qquad (2.35)$$

因为F_d是连续函数，在两个极小值之间必有一个极大值

$$L_3 = 0 \qquad (2.36)$$

L_1，L_2和L_3相当于(2.23)，(2.24) 和 (2.20) 式中的L_c，L_b和L_o。作为动力函数的极小值，(2.33) 式由下述条件决定

$$\frac{\partial F_d}{\partial \Omega} = 0, \quad \frac{\partial}{\partial \Omega}\left[\frac{\partial F_d}{\partial \Omega}\right] > 0 \qquad (2.37)$$

这两个极小值确定了描述转变过程的状态方程。这个动力函数的“极小值条件”（2.37）式等价于（2.28）和（2.29）式的“摩擦条件”。因而，这里的动力函数类似于Landau理论中的自由能函数。然而，因为一级相变中的热滞的根源不同于二级相变，因而动力函数中含有不可逆热力学因子——摩擦。这是动力函数与Landau自由能函数之间的重要区别。

作为动力函数在两个极小值之间的极大值，（2.35）式由下面的条件决定

$$\frac{\partial F_d}{\partial \Omega}=0; \quad \frac{\partial}{\partial \Omega}\left[\frac{\partial F_d}{\partial \Omega}\right]<0 \qquad (2.38)$$

此式确定了无界面摩擦时的理想转变过程。动力函数的这个“极大值条件”等价于（2.20）式的“平衡条件”。

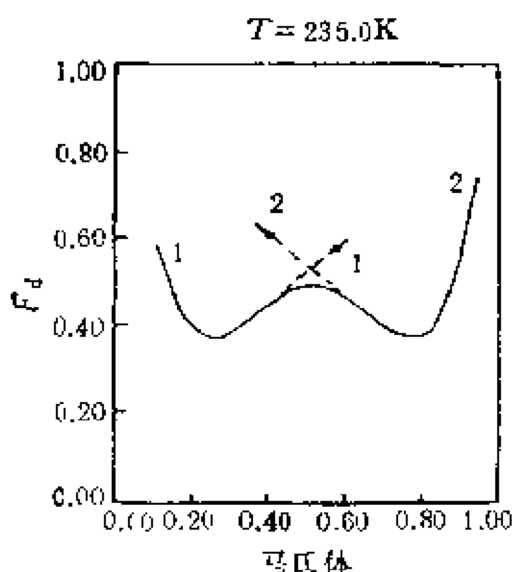


图 2.7 动力函数曲线[36]

动力函数的曲线示于图2.7中。两个极小值对应图2.6(c)—(e)中的转变回线，而极大值对应（a）和(b)的平衡转变线。如果没有界面摩擦，极大值将会消失，两个极小值将会重叠成一个极小值并出现在原来极大值的位置处。换言之，若无摩擦，动力函数将退化成自由能函数。由于摩擦的存在，自由能函数曲线的极小分裂为两个极小值，并在其间留下一个极大值。动力函数虽然与Landau自由能函数有相似处，但也有不同处。最主要之点是，体系并非总是移向动力函数的极小值。体系状态的变化必须遵守一个必要（而不充分）的条件，只能（不是必然）移向图中箭头所示的方向。原因是，界面移动的方向改变，摩擦力的方向也改变，体系在两个极小值之间处于静态，而不是自由能最低的平衡态。

2.6.2 转变循环中的回转点

热弹性马氏体转变的特点之一，是可以多次（数百次以上）反复地进行马氏体转变和逆转变，构成转变循环。但这种循环并非可逆循环，并不能沿原途径返回，而是形成一个带有热滞的回线。有许多研究者，如文献[23,25,44]，在一些合金中得到这类循环回线，均为完全循环，即由M_s到M_f，由A_s到A_f。它们的共同特点是：在循环中，冷却（马氏体转变）沿一条路径，加热（逆转变）沿另一条路径，且总有一段或长或短的直线段。图2.8示出部分转变的循环回线。可以看出，与完全循环类似，冷却和加热分别在两条线上。特别值得注意的是：在改变转变方向时（改变冷却加热的方向），转变的回转点并不在这两条线上。换言之，在冷却过程中，突然改为加热时，逆转变并不立即开始，而是有一滞后。仔细观察发现，这一滞后较小，开始逆转变要早于回线的

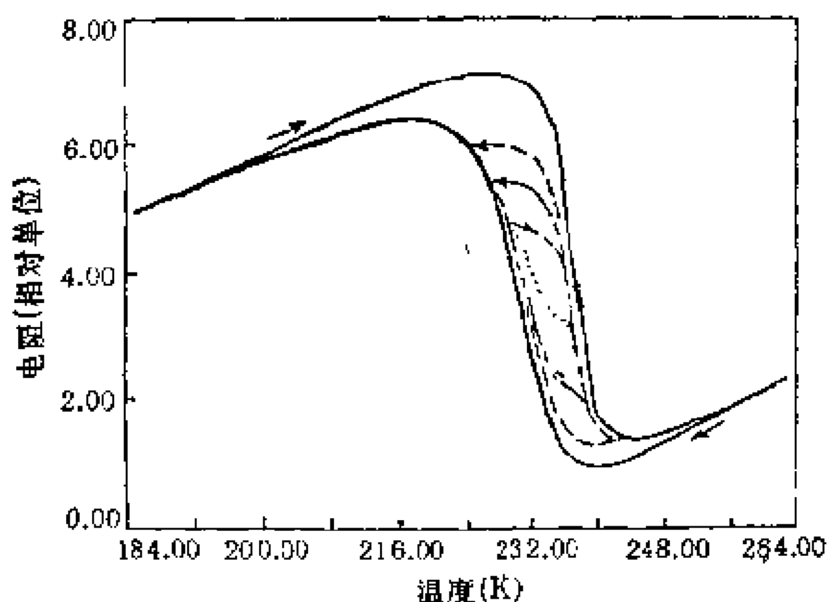


图 2.8 Cu-29%Zn-3%Al合金中的转变循环[25]

$M_s=257K$，$M_f=192K$，$A_s=210K$，$A_f=263K$

逆转变线段，然后逐渐回到逆转变线段上。开始逆转变的温度成分点被称为回转点，可借助于动力函数作理论分析，如图2.9所示。当过程到达T_1并由冷却改为加热时，动力函数及其极小和极

大值随温度而变化。当到达T_2时，动力函数的极大值具有冷却时的马氏体成分，此时若温度增高一个无穷小量，马氏体量也可能

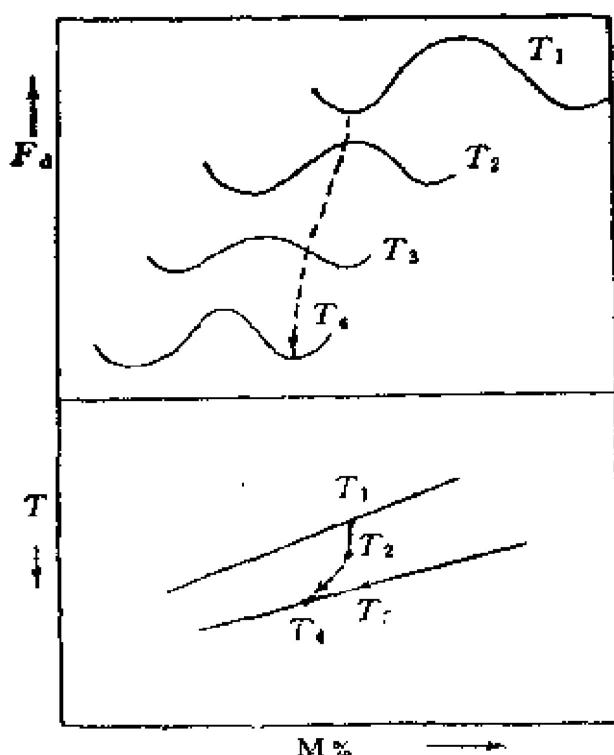


图 2.9 马氏体转变循环的回转点[17]

增高一个无穷小量，即逆转变可能开始。换言之，回转点可能是T_2，而不是原来预期的T_3。在T_2，动力函数极大值对应的马氏体百分数在T_3时为动力函数的极小值。这是一个非常微妙的情况，由于温度的变化，不能用Gibbs自由能来判断过程进行方向。但由于温度变化为无限小，则包含自由能在内的动力函数可能是一个参考性的判断标准。这只是一个例子，显示动力函数可能处理一些热力学平衡态或稳定的转变态的问题。

在本节的最后，将要引入这三个函数相互之间的关系。比较(2.20)，(2.28)，(2.29)和(2.35)式，得

$$\frac{\partial F_d}{\partial \Omega}=\frac{\partial F_n}{\partial \Omega}\left[\frac{\partial F_n}{\partial \Omega}-\frac{\partial F_t}{\partial \Omega}\right]\left[\frac{\partial F_n}{\partial \Omega}+\frac{\partial F_t}{\partial \Omega}\right] \qquad (2.39)$$

由于这一关系式，三个函数中只有两个是独立的。从实际的方便着想，可按下面的步骤建立这些函数：(1)由实验的转变回线

(的直线段)得到转变的状态方程;(2)分别由(2.29)和(2.30)式求得自由能函数F_n和摩擦函数F_f;(3)由(2.34)和(2.38)式计算动力函数.通常,动力函数的表达式很长而繁杂,其系数是温度和外应力的多项式,因而,另两个函数用起来比较方便。

2.7 理论应用的例子:Cu-29%Zn-3%Al合金

2.7.1 实验结果

笔者及其合作者对Cu-29%Zn-3%Al合金中的热弹性马氏体转变进行了研究[25,36,37],在这一节中将研究结果作为例子来显示上节理论的应用。热弹性马氏体转变首先由Kurdjumov和Khandros[38,39]报道,后来由Christian[40]加以讨论。这种转变的主要特点是可逆性和热滞,从那以后,热弹性马氏体转变被广泛地研究,并在许多合金中发现这种转变,如Ni-Ti[41],Ni-Al[42],Au-Cd[43],Ag-Zn[44],Cu-Al[45],Cu-Al-Ni[46],Cu-Zn[47],Cu-Zn-Al[48],Cu-Zn-Si[49],Cu-Zn-Sn[50],In-Tl[51],Fe-Pt[52],Fe-Mn[53],Fe-Mn-Si[54],等等。有大量关于这些合金体系的晶体学、形貌学、动力学和热力学的研究结果报道和综述评论,如文献[55—57]。

所研究的Cu-29%Zn-3%Al[33]的电子浓度(价电子数对原子数比值)约为1.4,马氏体转变开始温度M_s约为243K。多晶试样由密封在真空石英管中的高纯原材料熔化后冷凝而成,单晶试样用Bridgman方法制备。全部试样经950℃24h均匀化退火。淬火温度850℃,淬火介质10%NaOH冰水溶液。母相被鉴定为DO_3,点阵常数为$a=0.594$nm;马氏体被鉴定为单斜点阵,非常接近密排的正交点阵9R(ABCBCACAB…),点阵常数$a=0.507$nm,$b=0.439$nm,$c=3.726$nm。

特别设计的"纯切应力"实验[25,36]测定了马氏体点M_s和切应力τ之间的关系,并通过Claperon-Clausius方程求得转变的熵变

$$\Delta S=\varepsilon V_m\frac{d\tau}{d(M_s)} \tag{2.40}$$

其中ε是转变应变，V_m是摩尔体积，于是得转变熵变

$$\Delta S=-1.612\mathrm{J/(mol\cdot K)} \tag{2.41}$$

金相观察决定的$M_s=249\mathrm{K}$，$A_f=259\mathrm{K}$，按照Tong和Wayman [31]的公式

$$T_0=\frac{1}{2}(M_s+A_f) \tag{2.42}$$

于是转变的焓变为

$$\Delta H=\quad 409.5\mathrm{J/mol} \tag{2.43}$$

电阻测量 [25, 36] 得到的转变回线示于图2.9，不同外应力下的回线示于图2.10。由图2.9得到的转变温度为

$$M_s=257\mathrm{K},\ M_f=192\mathrm{K}$$
$$A_s=210\mathrm{K},\ A_f=263\mathrm{K} \tag{2.44}$$

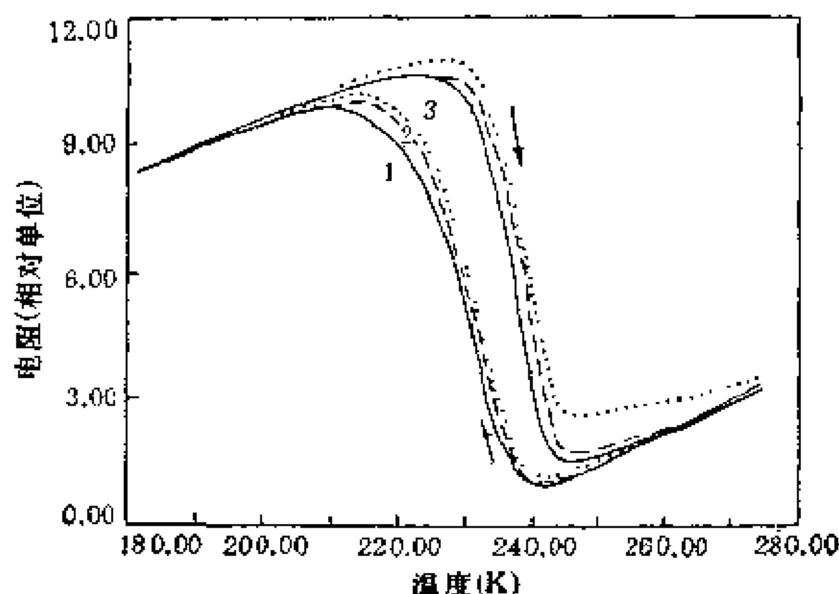


图 2.10 不同外应力下的马氏体转变回线 [25]

必须说明，前面纯切实验的试样为单晶，而电阻试样为多晶，因而转变温度有所不同。由图2.9和2.10可以看出，转变大体上可以分为三个阶段，如图2.11所示。（1）第一阶段是马氏体百分数

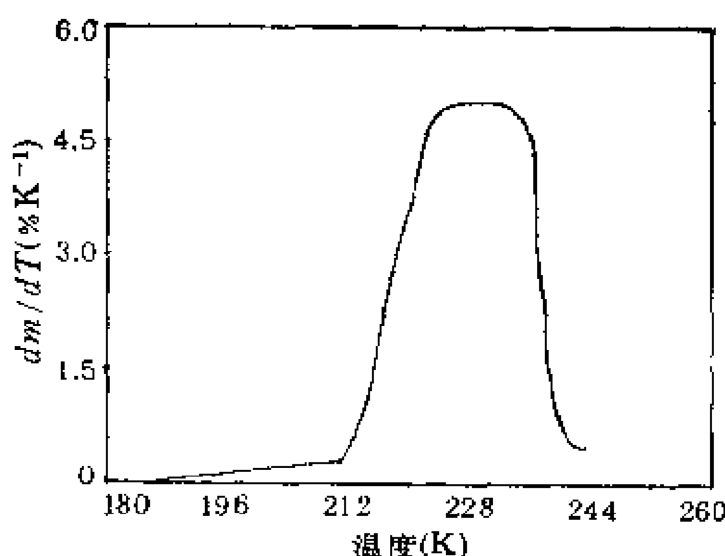


图 2.11 转变的三个阶段[39]

少于20%的阶段，转变的斜率随温度下降而增大，金相观察可见孤立马氏体片的出现和长大。（2）第二阶段相应于马氏体百分数约20—70%，马氏体量与温度成线性关系，金相观察可见"自调节（self-accommodating）"的马氏体片组在长长的马氏体片之间推进。（3）第三阶段是马氏体百分数大于70%的阶段，可观察到新的马氏体片在已被分割成小块的母相中形核长大。

2.7.2 理论处理

1. 转变态方程

为了简明起见，本节对实验结果只处理转变的线性部分，非线性部分将在第四章讨论。编写了一个电脑程序来拟合转变回线的线性部分，从而得到以下的冷却和加热的状态方程

$$L_c=\Omega+j_cT+K_c+(u_cT+\nu_c)\sigma=0 \qquad (2.45)$$

$$L_h=\Omega+j_hT+K_h+(u_hT+\nu_h)\sigma=0 \qquad (2.46)$$

其中，$j_c=0.05000\text{K}^{-1}$

$k_c=-11.95$

$u_c=1.479\times10^4\ (\text{K}\cdot\text{MPa})^{-1}$

$$\nu_c=-3.575\times10^2\ (\text{MPa})^{-1} \qquad (2.47)$$

$j_h = 0.07962 \quad K^{-1}$

$h_h = -18.7$

$u_h = 0.000 \ (K \cdot MPa)^{-1}$

$\nu_h = -3.110 \times 10^3 \ (MPa)^{-1}$

由这一对状态方程得到的结果与由实验得到的结果比较地示于图2.12中。

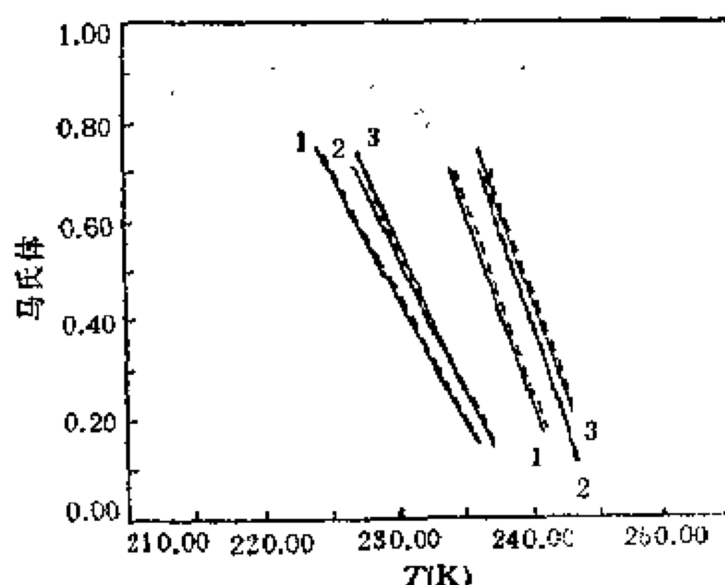


图 2.12 理论的（实线）和实验的（虚线）结果[26]

1：无外应力 2：49.0MPa 3，63.7MPa

2、自由能函数

由（2.30）可得自由能函数

$$F_s = A + (0.064T - 15.33)\Omega + 0.5\Omega^2 + (7.393\times10^{-5}T - 1.944\times10^{-2})\sigma\Omega \qquad (2.48)$$

这一函数没有量纲，只有相对单位。为了将自由能函数表在国际单位制（SI）中，必须进行换算。令F_n表自由能函数在SI单位中的值，则

$$F_n = NF_s \quad J/mol \qquad (2.49)$$

N为单为换算因子，单位为J/mol．按照Kaufman和 Cohen[29]，1 mol可发生马氏体转变的物质的自由能为

$$G = G_0 + g_{ch}\Omega + g_{el}\Omega + g_{in}\Omega \qquad (2.50)$$

其中G_0是百分之百母相时的自由能，g_{ch}，g_{el}和g_{in}是百分之百马氏体时的（高出的）化学自由能，弹性能和界面能。很明显，F_n和G是同一物理量，彼此应该恒等，即

$$F_n \equiv G \tag{2.51}$$

因为（AN）和G_0均表百分之百时的自由能，因而

$$(AN) \equiv G_0 \tag{2.52}$$

对于所研究的Cu-29%Zn-3%Al合金[25]

$$g_{ch} = 1.612T - 409.5 \quad \text{J/mol} \tag{2.53}$$

当外应力为零时，由(2.47)，(2.52)式联合得

$$[(0.06451T - 15.53)\Omega + 0.5\Omega^2]N \equiv (1.612T - 409.5)\Omega + (g_{ch} + g_{el})\Omega \tag{2.54}$$

比较等示两端的（$T\Omega$）项的系数可得

$$N = 24.99 \quad \text{J/mol} \tag{2.55}$$

于是，体系的自由能函数为

$$F_n = G_0 + (1.612T - 383.1)\Omega + 12.49\Omega^2 + (1.847\times10^{-3}T - 0.4858)\sigma\Omega \quad \text{J/mol} \tag{2.56}$$

3. 摩擦函数

由（2.30）式可得摩擦函数为

$$F_r = (-3.875 + 1.633\times10^2\sigma)\Omega - (0.01951 - 7.393\times10^{-5}\sigma)\Omega T \quad \text{J/mol} \tag{2.57}$$

以及

$$\begin{aligned} F_r &= H_r - TS_r \\ H_r &= (-3.875 + 1.633\times10^2\sigma)\Omega \\ S_r &= (0.01951 - 7.393\times10^{-5}\sigma)\Omega \end{aligned} \tag{2.58}$$

其中摩擦函数F_r摩擦准焓H_r和摩擦准熵S_r均无量纲，只有相对单位。但也可以通过换算因子N转化为SI单位，于是得

$$\begin{aligned} F_r &= H_r - TS_r \quad \text{J/mol} \\ H_r &= (-96.84 + 0.4081\sigma)\Omega \quad \text{J/mol} \\ S_r &= (0.4875 - 1.847\times10^{-3}\sigma)\Omega \quad \text{J/(mol·K)} \end{aligned} \tag{2.59}$$

4. 动力函数

自由能函数加上摩擦函数足以完全地描述马氏体转变的动力学行为。但是，这两个函数联合而成的动力函数有时能更直接地与转变回线相联系。在外力作用下的动力函数的系数非常复杂，已被笔者存入一个专门的电脑程序中[36]。图2.13示出动力函数在两个不同温度下的图形。当外力为零时，动力函数的形式是

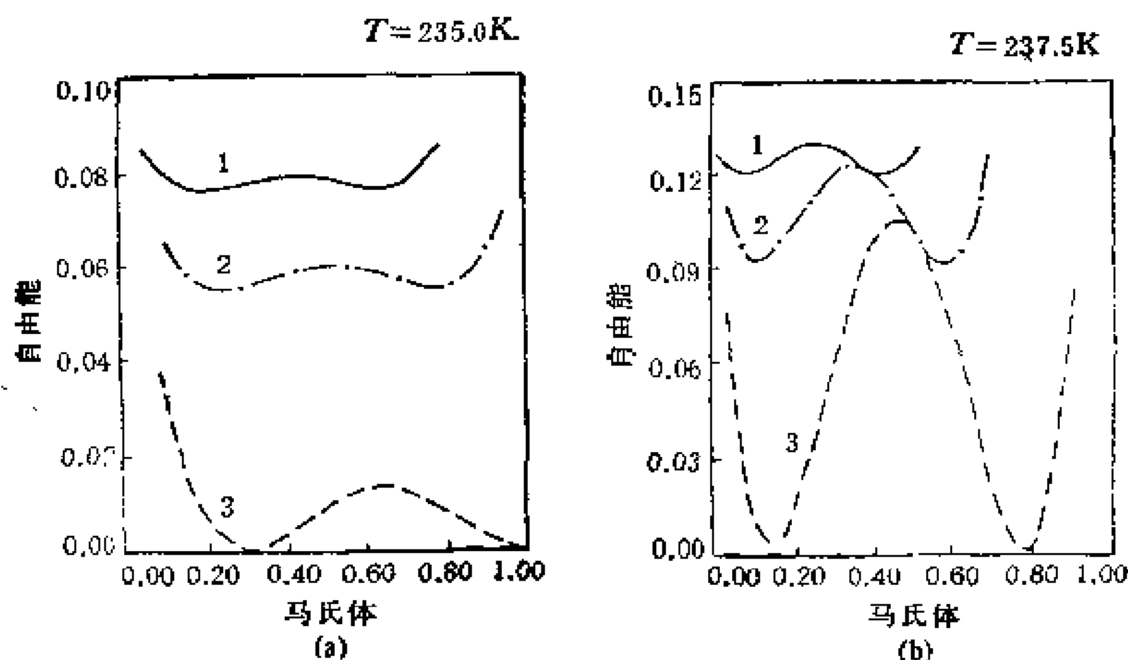


图 2.13 Cu-29%Zn-3%Al合金中的动力函数[36]

1，无外应力；2，49.0MPa；3，63.7MPa

$$F_d = A(T) + B\Omega + C\Omega^2 + D\Omega^3 + \Omega^4$$

$$B = -13698 + 170.39T - 0.79646T^2 + 0.0009763T^3 \quad (2.60)$$

$$C = 1386.4 - 11.489T + 0.023801T^2$$

$$D = -61.299 + 0.253857T$$

很容易把F_d用单位转换因子N换算到SI单位中，这里不再列出。

如前面指出，到此为止的所有推导，均基于一个假设：相界面向两个（正，负）方相推移的摩擦相等。这仅是初级近似，当摩擦不再对称时，所有的推导都要相应改变，但动力学行为的基本特点和有关结论定性地保持不变。目前，尚无足够的物理基础

对摩擦的不对称性作出定量的假定，因而在此只示出当摩擦的不对称性不能忽略不计时，动力函数曲线所示的不对称变化，参见图2.14。

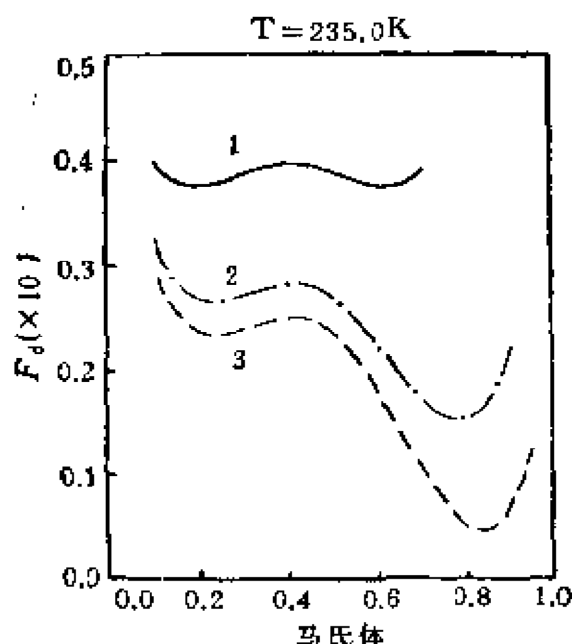


图 2.14 具有不对称摩擦的动力函数曲线[36]

1：无外应力 2：49.0MPa 3：63.7MPa

参 考 文 献

[1] Cech and J. H. Hollomon, Rate of Formation of Isothermal Martensite in Fe-Ni-Mn Alloy, *Trans. AIME*, May, (1953), pp.681—689.

[2] L. D. Landau, On the Theory of Phase Transitions, *Phys.Z. Sowjetunion* 11 (1937), pp.26-40. and 11 (1937), pp. 545-555; Collected Papers of L. D. Landau, edited by D. ter Haar, Pergamon, Oxford, 1965, pp.193—216.

[3] A. F. Devonshire, Theory of Barium Titanate——part I, *Phil. Mag.*, 40 (1949), pp.1040—1063.

[4] A. F. Devonshire,Theory of Barium Titanate——part II, *Phil. Mag.*, 42 (1951), pp.1065—1079.

[5] A. F. Devonshire, Theory of Ferroelectrics, *Advances in Physics*, 3 (1954), pp.85—130.

[6] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, Statistical Physics, Pergamon press, Oxford, 1980. chapter 14.

[7] F. Falk, Landau Theory and Martensitic Phase Transition,ICOMAT-82, Int. Conf. On Martensitic Transformations, Leuven, Belgium (edited by L. Delaey and M. Chandrasekaran), 1982,

pp.3-15.

[8] F. Falk, Martensitic Domain Boundaries in Shape Memory Alloys as Solitary Waves, *ibid.*, pp.204—208.

[9] G. B. Olson and M. Cohen, Classical and Nonclassical Mechanisms of Martensitic Transformations, *ibid.*, pp.75—88.

[10] N. Yasunaga, Y. Funatsu, S. Kojima, *et al.*, Ultrasonic Velocity Near the Martensitic Transformation Temperature, *ibid.*, pp. 603—608.

[11] S. Koshimizu and W. Benoit, Internal Friction Measurements and Thermodynamical Analysis of a Martensitic Transformation. *ibid.*, pp.679—684.

[12] K. G. Wilson, Non-Lagrangian of Current Algebra, *Phys. Rev.*, 179 (1969), no.5, pp.1499—1512.

[13] K. G. Wilson, Renormolization Group and Critical Phenomena. I. Renormolization Group and the Kadanoff Scaling Picture, *Phys. Rev.*, B4 (1971), pp.3174—3183. Renormolization Group and Critical Phenomena. II. Phase-Space Cell Analysis of Critical Behavior, *Phys. Rev.*, B4 (1971), pp.3184—3205.

[14] K. G. Wilson, Feynman-Graph Expansion for Critical Exponents, *Phys. Rev. Letters*, 28 (1972), no.9, pp.548—551.

[15] A. D. Bruce and R. A. Cowley, Structural Phase Transitions, Taylor & Francis, London, 1981.

[16] T. Mitsui and J. Furuchi, Domain Structure of Rochelle Salt and KH_2PO_4, *Phys. Rev.*, 90 (1953), pp.193—202.

[17] J. W. Cahn and J. E. Hilliard, Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy, *J. Chem. Phys.*, 28 (1958), pp.258—267. Free Energy of a Nonuniform System. III. Nucleation in a Two-Component Incompressible Fluid, *J. Chem. Phys.*, 31 (1959), pp.688—699.

[18] S. M. Allen and J. W. Cahn, A Microscopic Theory for Antiphase Boundary Motion and Its Application to Antiphase Domain Corsening, *Acta metall.*, 27 (1979), pp.1085—1095.

[19] F. Falk, Model Free Energy, Mechanics and Thermodynamics of Shape Memory Alloys, *Acta metall.*, 28 (1980), pp.1773—1780.

[20] R. J. Salzbrenner and M. Cohen, On the Thermodynamics of Thermoelastic Martensitic Transformation, *Acta metall.*, 27 (1979), pp.739—748.

[21] A. Amengual, F. Garcias, F. Marco, *et al.*, Acoustic Emission of the Interface Motion in the Martensitic Transformation of Cu-Zn-Al Shape Memory Alloy, *Acta metall.*, 36 (1988), pp.2329—2334.

[22] J. Baram and M. Rosen, The Thermoelastic Phase Transition in Au-Cd Alloys Studied by Acoustic Emission, *Phil. Mag.*, A 44 (1981), pp.895—903.

[23] I. Cornelis and C. M. Wayman, Experiments on Hysteresis in a Thermoelastic Martensitic Transformations. *Scri. metall.*, 10 (1976), pp.359—364.
[24] C. M. Wayman, Some Recent Developments in Martensitic Transformations, Symposium on New Aspects of Martensitic Transformations, JIM, Kobe, Japan.1976, pp.159—170.
[25] Y. Deng and G. S. Ansell, Investigation of Thermoelastic Martensitic Transformation in a Cu-Zn-Al Alloy, *Acta metall.*, 38 (1990), pp.69—76.
[26] J. Li and G. S. Ansell, The Effect of Thermal Cycling on the Thermoelastic Martensitic Transformation in a Cu-Zn-Al Alloy, *Metall. Trans.*, 14A (1983), pp.1293—1297.
[27] C. M. Friend, The Effects of Applied Stress on the Reversible Strain in CuZnAl Shape Memory Alloys, *Scri.metall.*, 20(1986). pp.995—1000.
[28] Y. Deng and G. S. Ansell, Boundary Friction for Thermoelastic Martensitic Transformations, *Acta metall.*, 39(1991), pp.1995—1999.
[29] Y. Deng and G. S. Ansell, Thermoelastic Martensitic Transformation in Cu-Zn-Al Alloys, *J. of Materials Science*, 26(1991) pp.5254—5260.
[30] B. C. Weker, Zirconia——An Annotated Bibliography, Aerospace Res. Lab. Report, ARL, 1964, 64—205.
[31] O. J. Whittemore, Jr and N. N. Ault, Thermal Expansion of Various Ceramic Materials to 1500℃. *J. Am. Ceram. Soc.*, 39 (1956), no.12, pp.443—444.
[32] L. Kaufman and M. Cohen, Thermodynamics and Kinetics of Martensitic Transformations, *Prog. Metall.Phys.*, 7(1958), pp. 165—246.
[33] G.B.Olson and M.Cohen, Thermoelastic Behavior in Martensitic Transformations, *Scri. metall.*, 9(1975), pp.1247—1253.
[34] H.C.Tong and C. M. Wayman, On the Equilibrium Temperature in Thermoelastic Martensitic Transformations, *Scri. metall.*, 11 (1977), pp.341—343.
[35] J. Ortin and A. Planes, Thermodynamic Analysis of Thermal Measurements in Thermoelastic Martensitic Transformations, *Acta metall.*, 36(1988), pp.1873—1889.
[36] Y. Deng, Doctoral thesis, Rensselaer Polytechnic Institute, Troy, New York, U.S.A.,1984.
[37] 邓永瑞, G.S.Ansell, Cu-Zn-Al合金中热弹性马氏体的高压电镜观察, 金属学报, 23(1987), pp.A464—469.
热弹性马氏体的长大, 金属学报, 26(1990), pp.A382—384.
[38] Г. В. Курдюмов и л.г. хандрос, о "тероупругом" равновесий примартенситных превращениях, доклады академии, Наук,

CCCP, 66(1949), pp.211—214.
[39] G.V.Kurdjumov, The Nature of Martensitic Transformations, *J. Metals*, 11(1959), pp.449—453.
[40] J. W. Christian, The Theory of Transformations in Metals and Alloys, Pergamon, Oxford, New York, 1975.
[41] F.E.Wang, W. J. Buehler and S. J. Pickart, Crystal Structure and a Unique "Martensitic" Transition of TiNi, *J. of Applied Physics*, 36 (1965) 3232—3239.
[42] Y. K. Au and C. M. Wayman, Thermoelastic Behavior of the Martensitic Transformation in β'NiAl Alloys, *Scri. metall.*, 6 (1972), pp.1209—1214.
[43] L.C.Chang and T.A.Read, Plastic Deformation and Diffuionless Phase Changes in Metals——The Gold-Cadmium Beta Phase, *Trans. AIME*, 191 (1951), pp.47—52.
[44] I. Cornelis and C. M. Wayman, The Shape Memory Effect in AgZn Alloy, *Scri. metall.*, 8 (1974), pp.1321—1326.
[45] H. Tas, L. Delaey and A. Deruyttere, Stress Induved Phase Transformations and the Shape Memory Effect in β_1' Cu-Al Martensite, *Scri.metall.*,5 (1971), 1117—1124.
[46] K. Otsuka and K. Shimizu, Morphology and Crystallography of Thermoelastic γ' Cu-Al-Ni Martensite, *Japan J. of Applied Physics*, 8 (1969), pp.1196—1204.
[47] H. Pops and T. B. Massalski, Thermoelastic and Burst-Type Martensites in Copper-Zinc Beta Phase Alloys, *Trans.AIME*, 230 (1964), pp.1662—1668.
[48] G. Balcclo, R. Rapacioli and M. Ahlers, The Rubber Effect in Cu-Zn-Al Martensite, *Scri.metall.*, 12 (1978), pp.1069—1074.
[49] D. V.Wield and E. Gillam, Shape Memory Effect and Pseudo-elasticity in Cu-Zn-Si, *Scri.metall.*, 6 (1972), 1157—1160.
[50] J. D. Eisenwasser and L. C. Brown, Pseudoelasticity and the Strain-Memory Effect in Cu-Zn-Sn Alloys, *Metall. Trans.*, 3 (1972) pp.1356—1363.
[51] Z. S. Basinski and J. W. Christian, Crystallograph of Deformation by Twin Boundary Movements in Indium-Thallium Alloys, *Acta metall.*, 2 (1954), pp.101—107.
[52] A. Kussmann G. Countess of Rittberg, Untersuchung uber die Umwandlungen in System Platin-eisen, *Z. Metallkde*, bd. 41 (1950), pp.470-477.
[53] K. Enami, A. Nagasawa and S. Nenno, Reversible Shape Memory Effect in Fe-base Alloys, *Scri.metall.*, 9 (1975), pp.941—948.
[54] A. Sato, E.Chishima, K.Soma, *et al.*, Shape Memory Effect in $\gamma \rightleftharpoons \varepsilon$ Transformation in Fe-30Mn-1Si Alloy Single Crystals, *Acta metall.*, 30 (1982), pp.1177—1183.

[55] A. Brown and J. H. Westbrook, Intermetallic Compounds, Wily, New York, 1967, pp.301—374.
[56] M. Wilkens and K. Schubert, Uber die Kristallstrukturen von Au_3 Zr(r), Au_3 Zn_5 und Einigen Varianten, *Z. Metallkde.bd.*, 49 (1958), pp.633—644.
[57] H. Warlimont and L. Delaey, Martensitic Transformations in Copper-, Silver- and Gold-based alloys, *Prog. Materials Science*, V18 (1974).

第三章　马氏体转变的相界面理论

3.1　引　　言

马氏体转变的晶体学唯象理论[1~7]，非常成功地预见或证实了实验结果。但这一理论并不涉及转变的动力学或机理。另一方面，按Landau理论建立起来的马氏体转变的动力学和热力学的理论处理[8~12]不能很好地预见晶体学的实验结果，也不能预见某些动力学的现象，如热滞。本章将要建议一个把晶体学唯象理论与上章建议的动力学唯象理论统一起来的理论方法，其基本考虑是：马氏体转变依赖界面移动，而界面中含有转变的全部信息；马氏体和母相之间的界面是把母相点阵转变为马氏体点阵（或相反的转变）的执行机构，它又是一个把能量转换成热耗散的不可逆热机。为简单起见，晶体学唯象理论简称为晶体学理论，上章建议的动力学唯象理论简称为动力学理论，本章的目的是通过界面把两种理论统一起来。

本章的注意力将集中在马氏体和母相之间的界面上。界面将定量地用张量**D**来描述，**D**即为晶体学理论中的平面不变应变。**D**由一个旋转张量**R**，一个Bain畸变张量**B**，和一个简单切变张量**S**的乘积构成，其中**B**使母相点阵变为马氏体点阵，**R**和**S**使整个应变为一平面不变应变。因此，**D**起着点阵转变机构的作用。另一方面，**D**也可看作是由不变面的法矢**p′**和不变面的位移矢量**d**构成。一般而言，**p′**不是一个有理的低指数面，而是由许多低指数的面曲折构成。这些不同的构成方式，或者说这些小面的排列方式，构成界面摩擦的准熵Sr。位移矢量**d**引起弹塑性应变，构成界面摩擦的准焓Hr。因而，界面起着热机的作用，**D**引起界

面摩擦和热滞。可以看出D在马氏体转变（界面推移）过程中的重要作用，加上D在形核过程中（与$\Delta(x)$一起)的作用,本书将认为D张量是最重要的概念及核心参量，在马氏体转变中扮演如此重要的角色,必须详加分析.马氏体转变的晶体学唯象理论在附录Ⅰ中介绍，在此基础上，本章介绍一个新的理论，以及几个具体的例子。

3.2 马氏体转变的晶体学

前言后所列出的马氏体转变的基本特点指出，马氏体和母相的取向关系及马氏体片析出的惯习关系，是转变的两个根本特点。取向关系指两相各有一个晶面和一个晶向（都是指数比较低的）分别彼此平行。惯习关系指新相的片状（或棒状）沿母相一定的晶面（或晶向）析出。Kurdjumov和Sachs[13]，Nishiyama[14]，Greninger和Troiano[15]是最先研究取向关系和惯习关系的学者。在Fe-C和Fe-Ni-C合金中，板条马氏体的惯习面是{111}，片状马氏体的惯习面是{225}或{259}。取向关系有如下几种。

1. Kurdjumov-Sachs 取向关系[13]

   $\{111\}_A /\!/ \{011\}_M$，$\langle 0\bar{1}1\rangle_A /\!/ \langle 1\bar{1}1\rangle_M$

2. Nishiyama（西山）取向关系[14]

   $\{111\}_A /\!/ \{011\}_M$，$\langle 1\bar{2}1\rangle_A /\!/ \langle 01\bar{1}\rangle_M$

3. Greninger-Troiano取向关系[15]

   $\{111\}_A /\!/ \{011\}_M$具有1°误差

   $\langle 10\bar{1}\rangle_A /\!/ \langle 11\bar{1}\rangle_M$具有2.5°误差

图3.1示出这些取向关系。在钛合金和锆合金中[16,17]，马氏体转变是从体心立方点阵到密排六方点阵，其取向关系是Burgers关系，如图3.2所示。即

$\{110\}_{BCC} /\!/ \{0001\}_{HCP}$

$\langle 1\bar{1}1\rangle_{BCC} /\!/ \{11\bar{2}0\}_{HCP}$

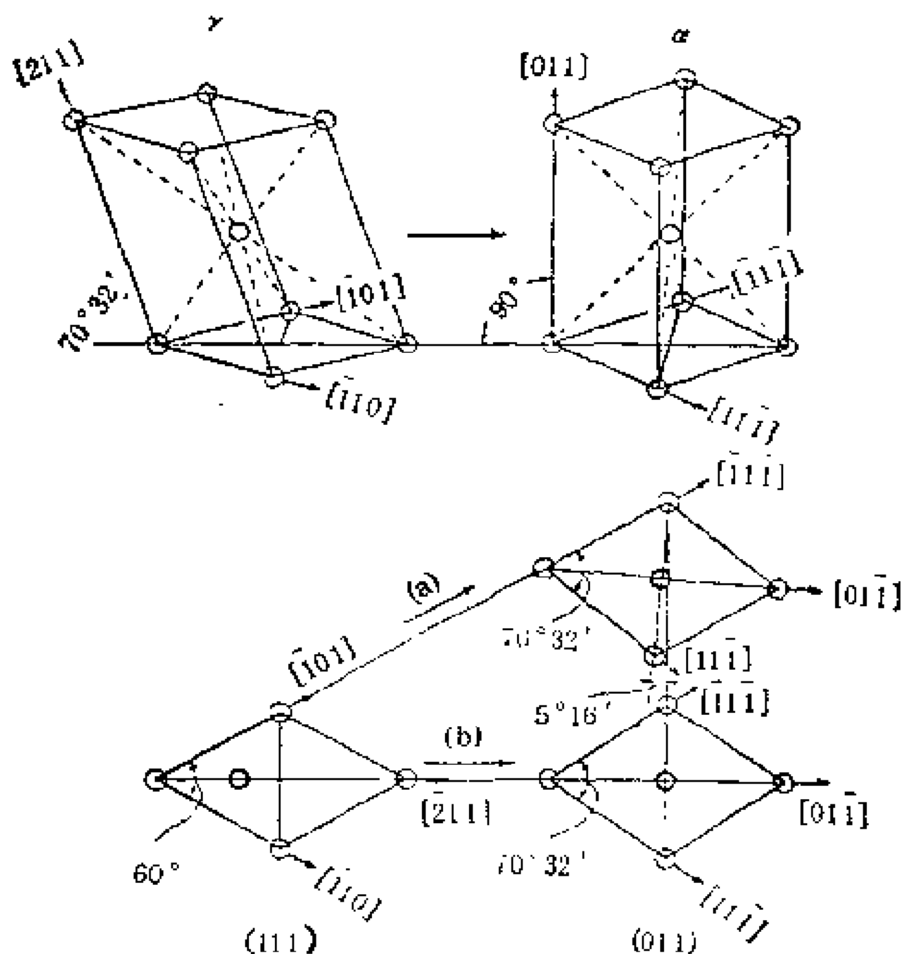


图 3.1 Fe-C和Fe-Ni-C合金中马氏体转变的取向关系
(a) Kurdjumov-Sachs取向关系[13]；
(b) Nichiyama取向关系[14]

对于Cu-Zn，Cu-Zn-Al和Cu-Al-Ni等合金中的热弹性马氏体转变，点阵类型由DO_3到轻微单斜（a，b轴相互垂直，c轴偏离垂直位置3°左右）的9R（或18R），其惯习面可能是{2 11 12}，取向关系大约是[18]

$$\{011\}_{母相} /\!/ \{128\}_{马氏体}$$

$$\langle 11\bar{1}\rangle_{母相} /\!/ \langle 2\bar{1}0\rangle_{马氏体}$$

对于二氧化锆中的马氏体转变，由四方点阵到单斜点阵，惯习面为{761}或{671}，以马氏体点阵为基准。纯二氧化锆的取向关系是[19]

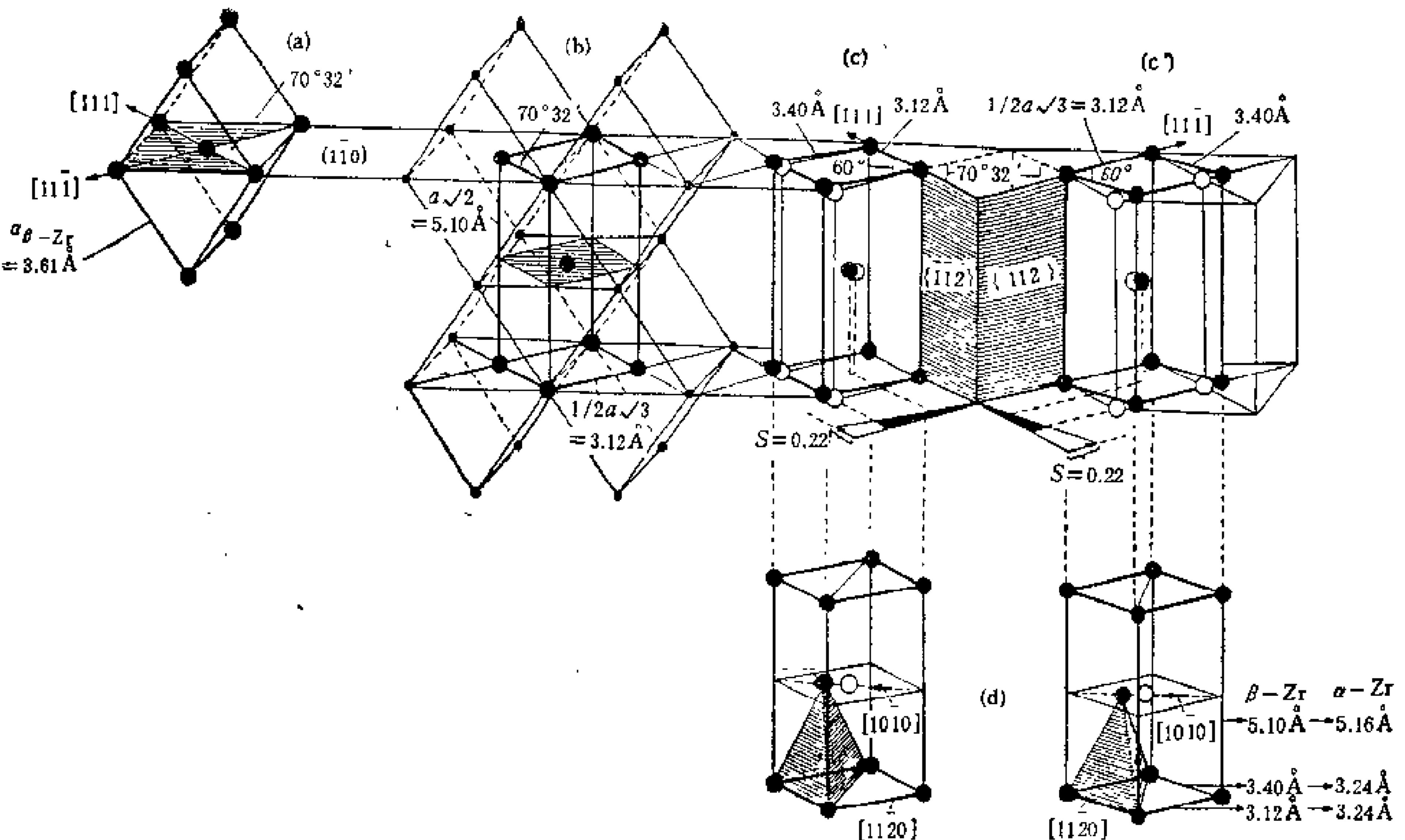


图 3.2 金属锆中马氏体转变的取向关系 [16,17]

{100}单斜∥{100}四方

〈001〉单斜∥〈100〉四方

而MgO部分稳定的ZrO_2，其取向关系为[19]

(001) 单斜∥ (001) 四方

[100]单斜∥[100]四方

或

(100) 单斜∥ (100) 四方

[001]单斜∥[001]四方

总之，马氏体转变的晶体学关系，是一个根本性的关系，但到目前为止，还不能从能量学的角度作出圆满的解释。

晶体学理论在附录Ⅰ中有较详细的介绍，是一个成功的、甚至是定量的唯象规律，但并不涉及能量学，也不涉及机理。但仔细分析发现，W-L-R理论和B-M理论中的简单切变，在马氏体转变中以滑移或孪生的形式出现，尤其是孪晶，是可观察、可计数的，也就是说这一部分是转变的真实机理的一部分，并非只是唯象理论中的一个数学组成，而是一个客观存在。在 Bullough 和 Bilby等的理论中，这种简单切变是相界面中的位错排列产生的。因而，简单切变不仅是个物理存在，而且其根源，已与相界面的结构联系起来。因此，自然而然会想到，平面不变应变中的Bain畸变B，旋转R是否也是真实地存在于相变中，是否也与相界面的结构有关，甚至直接被包含在相界面之中呢？本章的回答是肯定的，而且可以被简单地和定量地表示出来。一切讨论将基于相界面和平面不变应变D之间的关系，而D的表达式

$$\mathbf{D}=\mathbf{RBS} \tag{3.1}$$

$$\mathbf{D}=\mathbf{I}+\mathbf{d}\mathbf{p}' \tag{3.2}$$

正好从物理本质上表达了界面的特点，(3.1)式决定了取向关系，(3.2) 式决定了惯习关系。

3.3 相界面的推移摩擦

3.3.1 现行的理论

一些研究者[20−27]认为，热弹性马氏体转变的热滞，来源于马氏体和母相之间界面在推移过程中的摩擦。但对于这种摩擦的认识和处理，是各不相同的。Olson和Cohen[20, 21]把这种摩擦处理为一种能量的消耗

$$E_f = \tau_0 \gamma_T \tag{3.3}$$

其中γ_T是转变的切应变而τ_0是移动界面的切应力（注意，在 Olson-Cohen以及其他一些学者的处理中，常常把转变仅看作是一个切应变，而不是看作一个平面不变应变。据笔者看来，尽管马氏体转变的平面不变应变中，切应变分量占主要部分，但这种简单的处理，除引入计算上的误差外，更重要的是使转变的物理本质变得模糊不清，因为平面不变应变包含着物理内容，这不是一个简单的应变）。按照他们的解释，这一能量消耗于"塑性调节(plastic accommodation)"。他们没有明确地指出，这一能量是转变为不可逆的热耗散，或是转变为其他形式的能量。按笔者看来，这一能量不可能转变为弹性能，因为弹性能的变化是可逆的，不会引起热滞。这一能量也不可能转变为内能，因为内能是化学自由能的一部分。因而，剩下的可能性是，这一能量转变为机械波能量，如Ortin和Planes[24]所指出，或者这一能量转变为不可逆的热耗散，如本章所论证。

Ortin和 Planes[24]认为，消耗于界面摩擦的能量，被称为不可逆功，转变为其他形式的能量，如晶体中的弹性波，而不是转变为不可逆的热。他们论证，在热弹性马氏体转变时试样释放或吸收的热由三部分组成：转变的潜热，贮存的可逆弹性能（焓），和不可逆功，后者主要用于推移界面。他们主要的假定是：热弹性长大行为等价于一个不可逆热量的"零增长(null production)"，于是，可以通过对一个转变循环（马氏体转变与逆转变）应用热力

学第一定律和第二定律，并由分析微分扫描量热资料，把上述三部分区分开并定量地求出。变种区分的理论基础是所谓“熵论证(entropy argument)”。熵论证的核心是:“热弹性平衡条件，等价于宇宙熵的零变化。”因而，对于马氏体转变，热量（$-Q_m$）由试样传入环境，相应的熵变是

$$-\Delta S_m \qquad 对于试样 \qquad (3.4)$$

$$\Delta S_{sur}=Q_m/T_m \qquad 对于环境 \qquad (3.5)$$

按熵论证，这两部分之和应为零，于是

$$\Delta S_m=Q_m/T_m \qquad (3.6)$$

由此作进一步推导可以区分上述三部分能量，因而定量地求得界面摩擦所需的能量。

但是，按笔者看来，熵论证的基础十分薄弱，有待进一步的论证分析。在前一章曾指出：热弹性平衡，并不等价于可逆的热力学平衡。前者有三种状态，即热力学平衡态，静态和稳定的转变态。其中只有第一种状态，即热力学平衡态，才等价于宇宙熵的零增长（零变化）。Ortin等[24]的文章指出，“宇宙熵的零变化与经典平衡热力学的可逆过程联系，而母相到马氏体的热弹性转变在热力学意义上并不可逆。”笔者同意这一论断，并认为由此立刻得到一个与“熵论证”不同的结果，即热弹性马氏体转变并不与宇宙熵的零变化相联系。此外，由热力学专著[26]中可知，一个过程的“可逆度（irreversibility）”是

$$I=TS_p \qquad (3.7)$$

其中Sp是熵增量（或叫熵产生，entropy production，即宇宙熵变）。对于一个热弹性马氏体转变，作为一个不可逆过程，必然是$I>0$，因而

$$S_p>0 \qquad (3.8)$$

因此，热弹性平衡条件，并不等价于宇宙的零熵变。“熵论证”可能并非正确。

3.3.2 界面摩擦的本质

马氏体转变中相界面推移摩擦的本质，迄今尚无清楚的了解或阐述。若把这种界面摩擦和普通的宏观滑动摩擦相比较，或许能得到一些启发。图3.3表出一个示意图，当普通滑动摩擦发生时，处于摩擦面附近的原子的振动加剧，能量和熵都急剧增大。当摩擦过去后，这些原子恢复原来的状态，把多余的能量和熵以不可逆热量的形式释放出来。与此相似，在界面摩擦的过程中，大量的原子（或原子层）由一个相的规则排列进入界面。由于界面中的原子排列比较混乱，具有较高的能量和熵值，则进入界面的原子的能量和熵迅速增加。在界面移过后，这些原子变为另一相的规则排列，多余的能量和熵以不可逆热损耗的形式释放出来。这很可能是界面推移摩擦的能量转换机制。这显然是一个单方向过程，并以消耗能量转化为不可逆热量为其特征，而不管转变是朝哪一个方向进行。

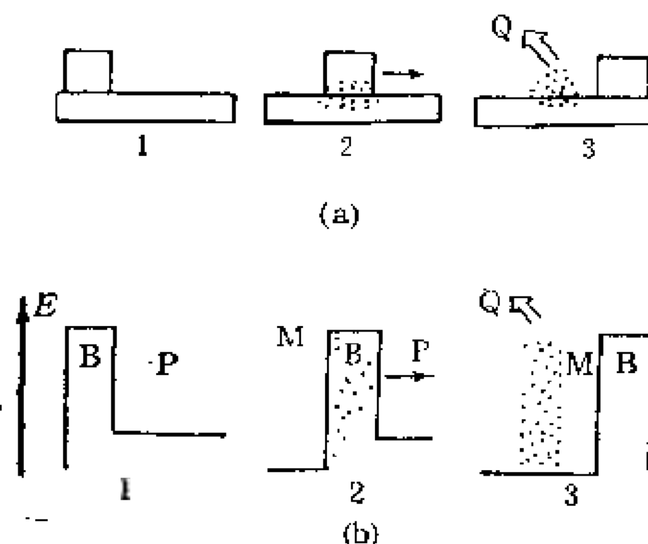


图 3.3 宏观滑动摩擦和界面推移摩擦的示意图

(a) 宏观滑动摩擦

(b) 界面推移摩擦

基于这一认识，则为了计算界面摩擦消耗的能量，必须知道

界面所含的焓和熵。上一章引入摩擦函数以描述界面摩擦所消耗的能量，并且摩擦函数F_f中含有摩擦准焓 H_f和摩擦准熵S_f。因而，自然而然地，把摩擦函数中的准焓，定义为界面所包含的焓，而把摩擦函数中的准熵，定义为界面所包含的熵。这种规定作为本书的基本论点之一，并非一种权宜之计，而含有重要的物理内容，下面各节将作详细的诠释和理论的计算。

3.4 界面摩擦的计算

在这一节，将对Cu-Zn-Al合金[25-27]，Cu-Zn合金[29]和Cu-Al-Ni[30]合金在马氏体转变过程中的界面摩擦作定量计算。上一章引入的摩擦函数F_f，被定义为克服界面摩擦所消耗的能量

$$F_f = H_f - TS_f \tag{3.9}$$

其中H_f和S_f分别为摩擦准焓和摩擦准熵，并能通过实验的转变回线得到的状态方程定量地算出。对摩擦函数F_f的计算，将以下面3个合金为例来进行，以展示上章所建议理论的应用。

3.4.1 Cu-29%Zn-3%Al合金[25-27]

如上章所计算得到，这一合金的转变回线的线性部分，即20--70%M的范围，准焓和准熵分别为

$$H_f = (-96.84 + 0.4081\sigma)\Omega \quad \text{J/mol} \tag{3.10}$$

$$S_f = (0.4875 - 1.847\times10^{-3}\sigma)\Omega \quad \text{J/(mol·K)} \tag{3.11}$$

对于一个转变回线，一定量的马氏体对应于3个温度，即冷却段上的温度，加热段上的温度和两者的中点，即在热力学平衡态线上的温度，即

$$L_0 = \frac{dF_n}{d\Omega} = 0$$

(3.9) 式中的温度T，应是这一平衡态的温度，因为转变回线是由这一平衡态劈裂为二后所得到。在20—70%M部分，界

面推移摩擦所消耗的能量可由（3.10）和（3.11）式求得

$$\Delta F_r = 8.49 \qquad \text{J/mol} \tag{3.12}$$

现在假定，转变回线的面积与界面推移摩擦的耗能成正比，则可求得一个转变循环（一次马氏体转变和一次逆转变）在界面摩擦上消耗的能量。

首先，把文献[25]中的图5重新绘成图3.4，然后测得转变回线在20—70%之间的面积为

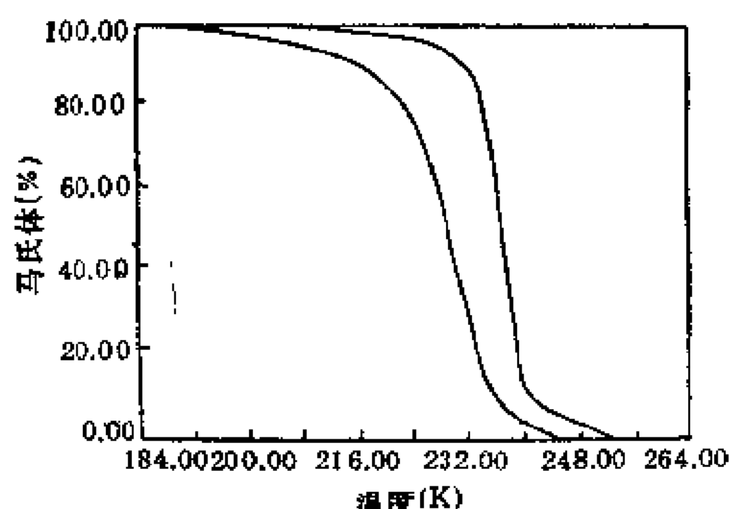


图 3.4 Cu-29%Zn-3%Al合金的马氏体转变回线[25]

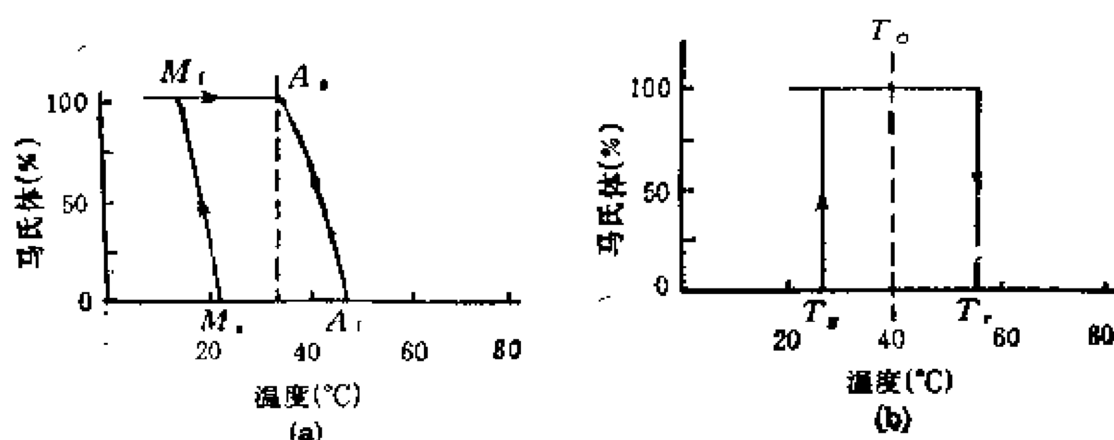


图 3.5 Cu-14%Al-4%Ni合金的马氏体转变回线[29]

(a) 单晶体单界面

(b) 单晶体多界面

$$A_t(20-70)\% = 415 \quad \% K \tag{3.13}$$

于是，由（3.12）和（3.13），单位回线面积所代表的耗能为

$$F_{tp} = \Delta F_t / A_t(20-70)\%$$
$$= 2.047\times 10^{-2} \quad (J/mol)/(\% K) \tag{3.14}$$

由图3.4，整个回线的面积可测得为

$$A_t(100\%) = 1034\% K \tag{3.15}$$

于是，消耗在界面摩擦上的能量为

$$F_t = [F_{tp}]\cdot[A_t(100\%)]$$
$$= 21.2 \ J/mol \tag{3.16}$$

3.4.2 Cu-14%Al-2.5%Ni合金（Salzbrenner-Cohen）

首先，把文献[29]的图2(d)和图1(a)重绘于此处的图3.5，并由图3.5(a)中的转变回线定出以下数据

$$\left.\begin{array}{l} M_s = 294K, \ M_f = 288K \\ A_s = 308K, \ A_f = 318K \end{array}\right\} \tag{3.17}$$

马氏体转变的焓变在文献[29]中已示出为

$$\Delta H = -515 J/mol \tag{3.18}$$

应用这些数据并把上章建议的理论用于此处，则在冷却和加热过程中的转变状态方程被决定为

$$\left.\begin{array}{l} L_c = \Omega + 0.1666T - 48.99 = 0 \\ L_h = \Omega + 0.09999T - 31.79 = 0 \end{array}\right\} \tag{3.19}$$

因而，无量纲的自由能函数和摩擦函数分别为

$$F_s = 0.5\Omega^2 + (0.1333T - 40.39)\Omega \tag{3.20}$$

$$F_r = (0.03333T - 8.599)\Omega \tag{3.21}$$

按照Tong和Wayman[31]计算T_o的公式

$$T_o = \frac{1}{2}(M_s + A_f) = 306K \tag{3.22}$$

于是，马氏体转变的熵变为

$$\Delta S = \Delta H / T_o = -1.683 \ J/(mol\cdot K) \tag{3.23}$$

按前一章表明的方法，得知这一合金的单位换算因子N为

$$N = 12.63 \quad J/mol \tag{3.24}$$

于是，可把无量纲的自由能函数和摩擦函数变换到国际标准单位制中

$$F_n = 6.315\Omega^2 + (1.684T - 510.1)\Omega \ J/mol \tag{3.25}$$

$$F_r = (0.4210T - 108.6)\Omega \ J/mol \tag{3.26}$$

按照3.4.1中由回线面积求界面摩擦耗能的方法，得到一个转变循环的单程的摩擦耗能为

$$F_r^m = 19 \quad J/mol \tag{3.27}$$

这一结果的数据，来自单晶体多界面的试样[29]。测量图3.5(b)，即文献[29]中图1(a)，单晶体单界面试样的一个转变循环单程的摩擦耗能可算出为

$$F_r^m = 23 \quad J/mol \tag{3.28}$$

何以多界面试样的摩擦耗能小于单界面试样，这原因尚不清楚，一种可能的原因是，多界面试样引起内应力场，而内应力场又影响准焓H_r和准熵S_r，如前一章所述。

3.4.3 Cu-39.5%Zn合金（Cornelis-Wayman）

首先把文献[30]的图重绘于此处图3.6，所示出的回线在约37－70%M的部分成线性关系。在冷却过程中，37%M对应于188K，而70%M对应于178K；在加热过程中37%M对应于201K，而70%M对应于187K；$T_D = 243K$。于是

$$\begin{aligned} L_c &= \Omega + 0.0330T - 6.574 = 0 \\ L_h &= \Omega + 0.0236T - 5.108 = 0 \end{aligned} \tag{3.29}$$

从而得到

$$\begin{aligned} F_z &= 0.5\Omega^2 + (0.02830T - 5.841)\Omega \\ F_r &= (4.700 \times 10^{-3}T - 0.7330)\Omega \end{aligned} \tag{3.30}$$

按照Arneodo和Ahlers[32]，一个Cu-40%（原子）Zn合金的ΔH为－199.3J/mol。虽然合金的M_s点对Zn含量极为敏感（对于

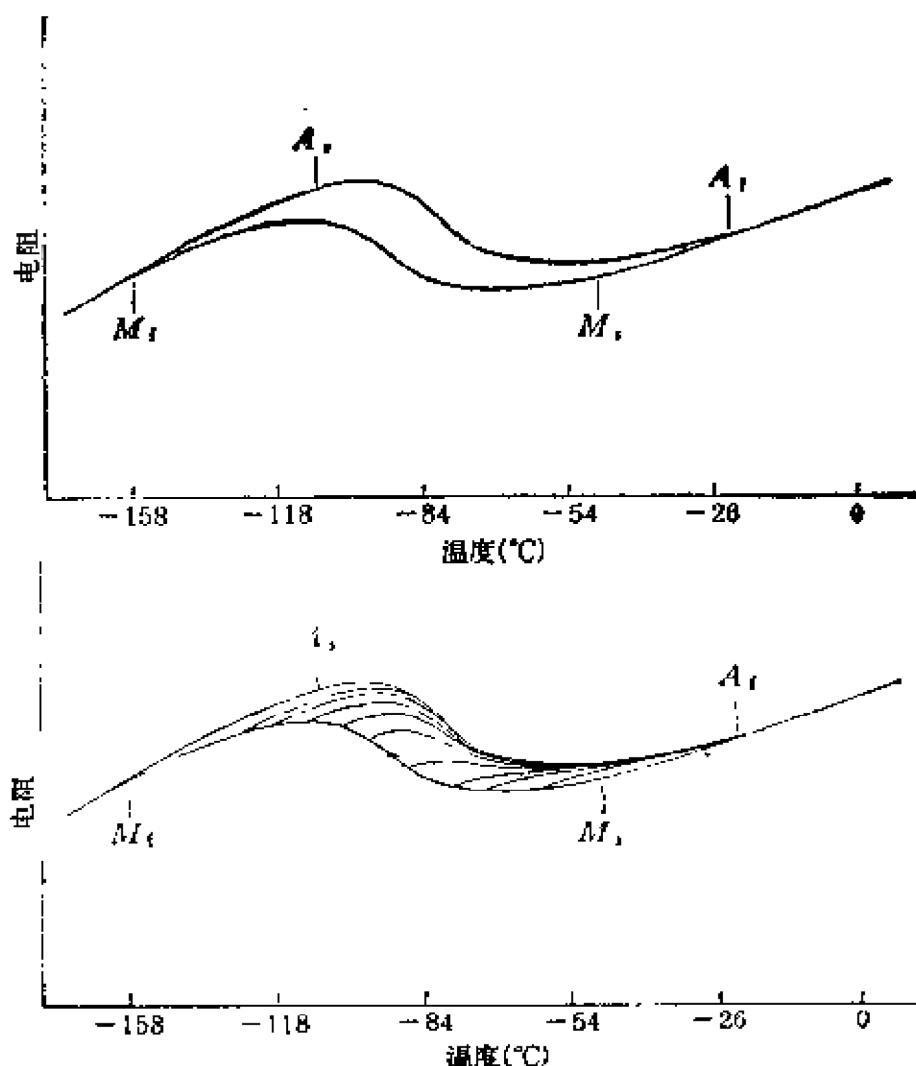


图 3.6 Cu-39.5%（原子）Zn合金的马氏体转变回线[30]

Cu-Zn二元合金及Cu-Zn-X三元合金)，但ΔH对Zn含量变化并不特别敏感，可参见文献[25]中表 1。于是，作为初级近似，文献[32]中Cu-40%Zn（原子）合金的ΔH可以用作文献[30]中Cu-39.5%Zn（原子）合金的ΔH。于是

$$\Delta S = -199.3/243 = -0.82\ \mathrm{J/(mol \cdot K)} \tag{3.31}$$

应用前一章介绍的方法，得

$$N = 28.98\quad \mathrm{J/mol} \tag{3.32}$$

$$F_n = 14.49\Omega^2 + (0.820T - 169.3)\Omega\quad \mathrm{J/mol} \tag{3.33}$$

$$F_r = (0.1362T - 21.24)\Omega\quad \mathrm{J/mol} \tag{3.34}$$

从而得到

$$F_f = 5.4 \quad \text{J/mol} \tag{3.35}$$

其它的数据资料，譬如[33-36]，及示于图3.7和图3.8的转变回线，均可用作界面摩擦的计算，只需先求得M%和T的关系及转变的熵变即可。

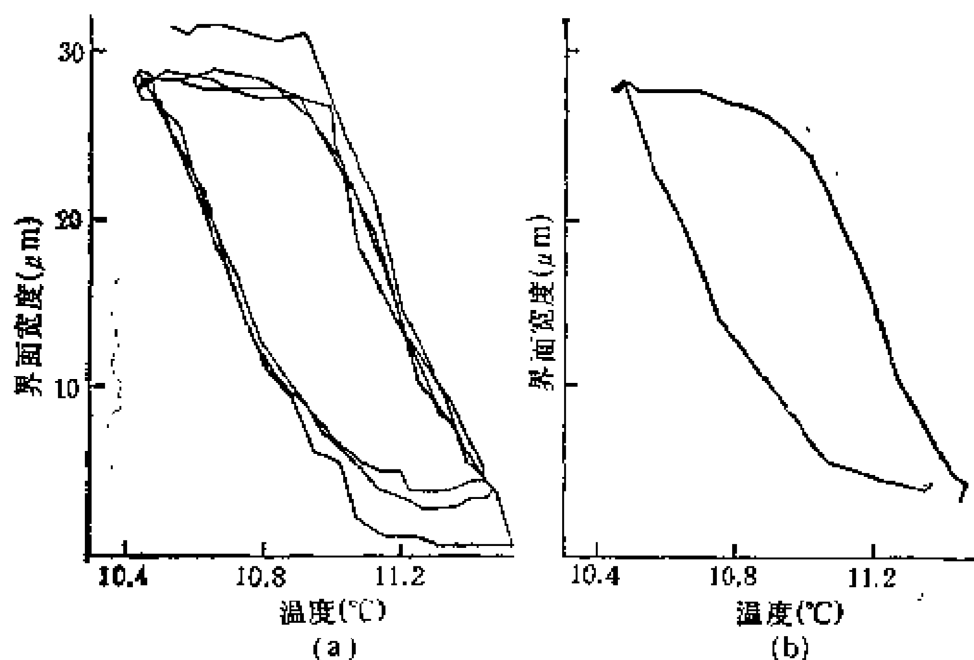
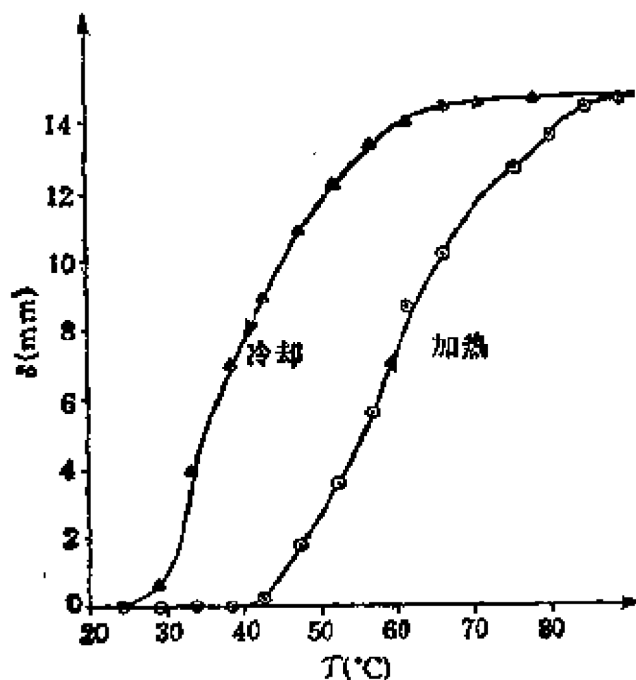


图 3.7 Cu-16.6%Al-14.9%Zn（原子%）合金的马氏体单片的转变回线[26]，竖轴为界面位置



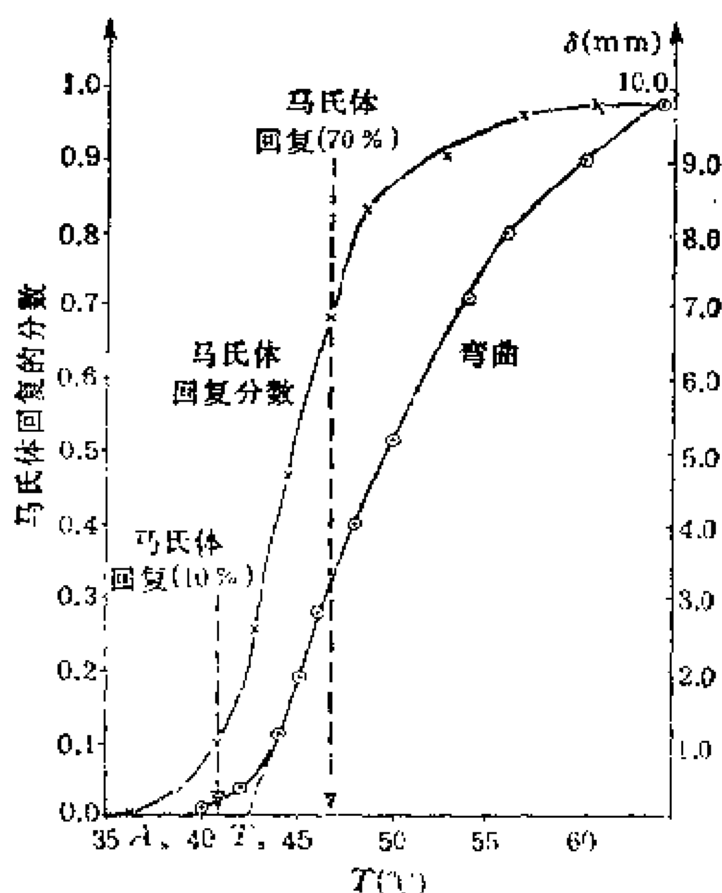


图 3.8 Cu-20.3%Zn-5.61%Al合金的马氏体转变回线[31]

3.4.4 讨论

首先比较不同研究者从同一数据来源计算得到的不同的界面摩擦的数值，这些用不同方法得到的结果归纳于表3.1中．其中文献[26]的方法即本书的方法。另外，有的数值乘了因子2，因为计算时为单程转变，此处为整个循环周期，即冷却过程与加热过程一起。从表3.1的结果可以看出，不同方法得到的结果虽然有些差异，但属同一数量级，而且数值接近。其中有些差异来自测量文献中转变回线的面积或线段的斜率等伴随的误差。文献[29]中得到的$E_r=26J/mol$，几乎直接来自实验，所用的假定最少，因而可能是最为可靠的。

尽管所得到的结果相近，但计算的方法和理论基础完全不

同，Ortin和Planes[24]的计算完全基于"熵论证"，对于这一论证的疑问已在上节中谈到。文献[29]中的计算，摩擦由开始转变的温度得到，即

$$F_r = \Delta S \cdot \Delta T \tag{3.36}$$

其中ΔT是两相平衡温度T_0和开始转变的温度之差。对于上一章图2.5中SC的情况，(3.36)式可能是简单而且正确的。如果转变引起弹性能，则转变不可能在单一温度完成，而是在一个温度范围完成，于是，一个类似(3.36)的式子应该用于每一个转变温度，求出平衡温度与转变温度的差值（指不同马氏体量的情况下）及熵变从而求出摩擦耗能，并把这些积分起来。实际上，本书所用的方法正是这样，只是采用了一个更为理论化和系统化的方式。可以说文献[29]的处理成为本书方式的一个特例。对于一个转变回线，如果冷却段与加热段平行，即摩擦准熵为零，则(3.36)式的形式对于回线的不同温度（或者说不同马氏体百分数）是相同的，则(3.36)式就足够了。如果冷却段和加热段不平行，即准熵不为零，则摩擦函数的形式体系就非常方便和实用

表 3.1 界面摩擦消耗的能量

研　究　者	摩擦耗能(J/mol)	试　样
Salzbrenner-Cohen[29]	26×2	单晶单界面[29]
Ortin-Planes[24]	51	单晶单界面[29]
Ortin-Planes[24]	48	单晶多界面[29]
Deng-Ansell[26]	23×2	单晶单界面[29]
Deng-Ansell[26]	19×2	单晶多界面[29]

了。此外，准焓H_r与准熵S_r的概念，不仅用于计算摩擦耗能，同时也用于联系界面与转变动力学和转变晶体学。因此，摩擦函数

（包含准焓和准熵）的引入，在本书的理论中，具有根本的意义。

3.5　相界面的构造

Olson和Cohen[37-39]彻底地讨论了母相和马氏体之间的界面的结构。他们认为完全共格与部分共格的界面均由位错构成，从面把位错分为共格位错与反共格位错，在本书第一章有简略的介绍。在一些形核模型中，如文献[40-42]，相界面也被看作由不同的位错构成。也有一些透射电镜的实验观察，在靠近界面处或者在界面内观察位错的结果已被报道，如文献[43-47]。在第一章也提到表面位错理论[5-6]，这一理论是用一种特殊的位错来处理转变晶体学和转变机理。

为了用位错模型来描述界面，至少需要引入6个参数，位错的Burgers矢量和位错线矢量。也许还需用统计方法或其它方法来处理大量位错，才能完全描述界面。因而，本章将要介绍的方法，引入一个由两个矢量决定的张量来描述界面，也许是一种简便实用的方法。这个张量就是晶体学理论中的平面不变应变张量**D**。从类比外推的角度来看，一个线缺陷位错，用一个矢量，Burgers矢量，来描述，那么，作为面缺陷的相界面，用一个张量(二阶)来描述，是完全符合逻辑的。

尽管界面位错的构成模型取得了一定的成功，而且有一定的观察实验结果，但本书的基本思路之一就是放弃界面的位错模型，而企图建立界面的平面不变应变张量模型。这一论证包含两重意思：（1）马氏体与母相的界面倾向于平行于由晶体学理论决定的不变面，因而，在理想的情况下，界面是由平行的不变面作为晶体学面构成。但是，由于转变引起的体积弹性能，或者由于马氏体片长大过程中遇到强大障碍，例如晶粒界，使相界面不能保持与不变面平行，于是，界面就可能由一些面组成，这些面可通过不变面经适当的旋转（空间的或数学上的）。这意味着界

面的法矢和畸变可能从张量D的旋转变换得到。这是对界面的晶体学角度的考虑。自然，不变面一般不是有理的低指数晶体学平面，因而应由小晶面曲折构成，这一特点将在3.7节进一步讨论。（2）马氏体与母相的界面也可看作一个连续介质的弹塑性薄层，而张量D描述这一薄层的弹塑性应变，这一应变薄层（界面）把两种不同的连续介质联结在一起。界面（及其法矢）可以变化，而界面层的法矢和畸变（位移）均可通过对D作矩阵变换求出。

本书的基本假定前提是：马氏体转变及逆转变依靠相界面的推移；这种马氏体和母相之间的界面包含了全部转变信息；界面不仅是把一种点阵转变为另一种点阵的执行机构，而且也是把能量转换为不可逆热耗散的不可逆热机；相界面可以完全地和唯一地用张量D来描述和表征，因而这一张量在马氏体转变中具有根本重要性和中心地位。

对于马氏体转变和逆转变，如果仅从晶体学的角度来考虑，则一些适当的形变或应变，包括Bain畸变和 Bogers-Burgers[48]两次切变，完全可以把马氏体点阵变为母相点阵，或者作相反的变化。但是，从能量学的角度考虑，则很难确定哪一种可能的应变是能量最低的途径。原因是很明显的，首先很难获得满足晶体学要求的各种转变应变的完全集合。其次，也很难比较这些转变应变的能垒高低。除非有一种转变应变具有这种奇妙的特点，在完成转变的前提下能够任意地、无限地降低能垒，从而具有最大的竞争力。平面不变应变恰恰具有这样的特点，如第一章所阐明。这就是为什么本书反复强调平面不变应变张量D的重要性，而且，在这一章，又把它和界面联系起来，以表征后者的晶体学特征和弹塑性特征。

马氏体转变的惯习面，在许多合金体系中已由实验测出，并由晶体学理论算出，两者符合很好。长期以来，惯习现象被认为与能量学有关。但迄今为止，也许只有本书第一章的平面不变应变的稀释，才能对此作出理论解释，才能说明何以惯习而就是不

变面。一般而言，相界面平行于不变面，从而得到惯习面。但是，由于转变的体积应变引起的弹性能越来越大，界面可能调整其方向（即马氏体片调节其形状）以降低弹性能。在这种情况下，界面可能不再保持与不变面平行，但马氏体片仍沿惯习面长大。表3.2示出几种合金的平面不变应变张量D。

表 3.2　三种合金的特征张量

合　金	Fe-31%Ni [7]	Cu-14.1%Al-4.2%Ni [18]
p′理论 p′实验	[0.1848 0.5948 0.7823] [0.1656 0.5770 0.7998]	[−0.1552 −0.6831 0.7136] [−1 −5 5]
d	$\begin{pmatrix} -0.047235 \\ 0.160116 \\ -0.152072 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -0.024024 \\ 0.125163 \\ 0.110452 \end{pmatrix}$
$\varepsilon_d = \lvert d \rvert$	0.22582	0.168649
D	$\begin{pmatrix} 0.99127 & -0.02809 & -0.03695 \\ 0.02958 & 1.09524 & 0.12526 \\ -0.02809 & -0.09045 & 0.88103 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.00373 & 0.01641 & -0.0165[illegible] \\ -0.019[illegible]3 & 0.91449 & 0.09075 \\ -0.01681 & -0.07545 & 1.07882 \end{pmatrix}$

合　金	Cu-29%Zn-3%Al [25-27]
p′理论 p′实验	[−0.1273 −0.6654 0.7445] [−2 −11 12]
d	$\begin{pmatrix} -0.023549 \\ 0.128401 \\ 0.108585 \end{pmatrix}$
$\varepsilon_d = \lvert d \rvert$	0.16981
D	$\begin{pmatrix} 1.00299 & 0.01540 & -0.01753 \\ -0.01634 & 0.91585 & 0.09559 \\ -0.01382 & -0.07117 & 1.08084 \end{pmatrix}$

3.6 把界面看作弹塑性薄层

3.6.1 基本假定

前面已经提到，马氏体与母相的界面可以看成连续介质的弹塑性薄层，从而储蓄有一定数量的弹性能，并消耗一定的塑性形变功。如图3.9所示，界面趋向于成一个平行于不变面的平面，但为了降低弹性能，界面也可能凸出成扁球面。这种界面附近分布的弹性能，是马氏体转变的能量学的一个重要组成部分，将在下章讨论。这里所处理的，是界面内所含有的弹性能（因有弹性应变）和所耗的塑性功（因还有塑性形变）。这里的基本假定是：界面层本身的弹性能和塑性功即为界面的准焓H_r。在3.3节中，一些

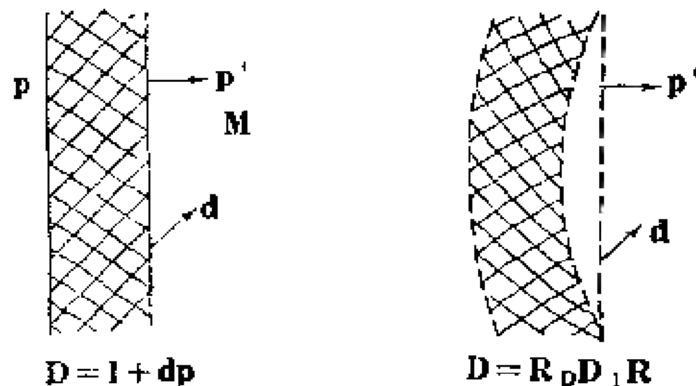


图 3.9 作为连续介质的弹塑性应变层的相界面

p′ 不变面的法线矢量

d 不变面的位移矢量

铜合金的准焓H_r已由实验的转变回线得出。为了诠释界面的准焓的物理意义，在此将由界面层的弹性能和塑性功定量地求出准焓H_r，以与3.3节由实验得到的准焓H_r比较。换言之，将由界面的特征张量**D**（在此表界面层的弹塑性应变）来算出准焓。按本节的基本假定，界面层的弹性能和塑性功构成准焓，即

$$H_r = -(E_a + W)_a \qquad (3.37)$$

从理论上严格计算弹性能E_a和塑性功W_a是很困难的，不但因为

理论的复杂性，同时也因为缺乏一些必要的材料的弹塑性数据。因此，在此只能作近似的估算，以表明本章的理论思路。

3.6.2 准焓的计算

为了近似估算，必须作出对模型的简化。第一步是把应变张量D分解为平行于不变面的单纯切应变和垂直于不变面的单纯法向应变（正应变），与两者相应的弹性能和塑性功分别为(E_s,W_s)和(E_n,W_n)，于是

$$H_r = -(E_s + E_n) - (W_s + W_n) \tag{3.38}$$

式中每一项只与一种简单的应变状态有关，因而计算可以简单得多。但是，由于不变面多半不是低指数的有理晶面，因而这种面的切变模量或杨氏模量的数据很难得到。因而，必须进一步作出以下的简化：（1）弹性能相对而言是很小的，小于塑性功的5%，因而可以暂时忽略不计；（2）转变的应变为$\varepsilon_d = |\mathrm{d}|/2a$，其中d为平面不变应变的位移矢量，$a$为点阵常数；（3）塑性功是在一常数应力$\sigma_d$下进行，$\sigma_d$的大小接近材料的屈服极限。于是

$$H_r = -V_m \varepsilon_d \sigma_d \tag{3.39}$$

其中V_m为摩尔体积。可以看出，作为张量D的构成矢量之一的不变面位移矢量d，在决定H_r的过程中起重要作用。

现在把Cu-29%Zn-3%Al合金[25-27]的数据用来计算H_r，作为以上思考的一个具体例子。该合金$V_m = 8.13\times10^{-6}\mathrm{m^3/mol}$，$\varepsilon_d =$ 0.17/2。这一合金的屈服极限无法得到，但可参照类似的合金来估计。按手册数据[49]，Cu-20.5%Zn-2%Al合金的$\sigma_s = 186$ MPa，Cu-28%Zn-1% Sn合金的$\sigma_s = 124-152$MPa，从而选定Cu-29%Zn-3%Al合金的$\sigma_d = 190$Mpa，于是

$$H_r = -131 \quad \mathrm{J/mol} \tag{3.40}$$

对比前一章算得的$H_r = -96.84$ J/mol[25]，这里的结果是大体合理的。

另一个例子将用文献[18，29]中的数据来进行。文献[18]中的合金为Cu-14.1%Al-4.2%Ni，其$M_s = 275.5$K（文献中表1，

No.23 合金)，而文献[29]的合金为Cu-14%Al-4%Ni，其$M_s=$ 274K（表1，No.4 试样）．因此，这两个合金可以近似地看作同一合金，从而得到$V_m=7.523\times10^{-6}m^3/mol$ [29] 及$\varepsilon_d=0.168649/2$ [18]．此外，由文献[18]的图5，得知转变在约139 MPa进行，此值可取作σ_d，从而得到

$$H_r=-82.5 \quad J/mol \tag{3.41}$$

从绝对值来说，这是H_r的下限．如果参照Cu-10%Al-1%Fe ($\sigma_b=186$ MPa)及Cu-13%Al-4%Fe($\sigma_b=379$ MPa) [49]，并取$\sigma_d=300$MPa，则得到

$$H_r=-190 \quad J/mol \tag{3.42}$$

这是绝对值的上限．前面以及 [26] 由实验得到的$H_r=-108.6$ J/mol（对于单晶体单界面 [29]）．因而，(3.41) 和 (3.42) 式给出一个大体合理的范围．这里并不是给出一个精确的计算结果，而只是用具体例子来阐明这样一个基本观点：界面的准焓来自界面层的弹性能和塑性功．以上的计算，完全没有考虑诸如转变温度、弹性的各向异性以及软模效应等对σ_d的影响，而这些影响无疑对计算H_r的数值是关系甚大的．

特别值得注意的是，这里的方法如果进一步简化，就可得导致与文献[29]中计算方法相类似的结果．如果把本节的σ_d用转变的切应力τ_c代替，把H_r看作文献[29]中的ΔG_{ch}^{A-M}，则两种计算方法有相同的形式．这里的差异是物理意义上的，是十分重要的：切应变是平面不变应变的主要部分，但两者决不等同，因而尽管切应力是σ_d的主要部分，但两者决不等同；同时，ΔG_{ch}^{A-M}含有H_r，但两者决不等同，前者还应含有TS_r的项．可以这样说，文献[29]的方法，是本节中所阐明的概念的一个退化和简化的特例．

3.7 把界面看作晶体结构

3.7.1 基本假设

在上一节中，为了计算能量，把界面看作连续介质的弹塑性

薄层。在本节中，为了计算熵值，将把界面看作由晶体学面构成的一种特殊结构。如图3.10(a)所示，界面倾向于平行不变面。然而，

图 3.10 作为不变面晶面构成的相界面

p'，不变面的法线矢量

p_1'，p_2'，p_3'，… 各低指数晶体小面的法线矢量

在大多数情况下，不变面并非低指数的有理的晶体学平面，因而很难简单地构成相界面。自然而然地设想，界面是一些低指数的有理晶面的微小平面曲折构成，其平均方向与不变面相同。前面已指出，在马氏体转变的实际过程中，为了减小体积弹性能，马氏体片可能成扁球形，于是界面（的平均面）弯曲，不再成平面，此时界面的特征张量D可能通过旋转（相似变换）来表征这种弯曲了的界面。这种弯曲了的界面仍然由低指数晶体学小面曲折构成，如图3.10(b)所示。这种相界面的模型与界面的位错模型不同，区别有下面两点：（1）界面是由与不变面有关的晶体学小面组成，而不是由位错构成；（2）界面由平面不变应变张量定量地描述，而不是由位错排列的Burgers矢量描述。

由大量的晶体学小面组成界面，这种组成的方式数目极其巨

大．这个组成方式的总数与一个熵值相联系，即界面的组态熵（位形熵），按本章的假定，这就是摩擦函数的准熵．界面──→小晶面──→组合方式──→组态熵──→摩擦准熵，是本小节的一个基本思路，也是本书的主要思考之一．相对而言，界面的位错模型中的大量位错线，由于其线张力和相互作用，Burgers矢量的守恒性，线缺陷的连续性，这些位错线的组态受到很大限制，因而组态熵相对来说是比较小的．与此不同，界面的不变面——晶体学模型，由于各小面彼此独立，不受限制，从而其组态熵比位错模型的要高得多，从这个意义上来讲，本小节所建议的这种界面模型，可以称为“高熵界面”模型．

3.7.2 准熵的计算

假定界面平行于不变面即惯习面，其单位法矢为$\mathbf{p}'$．一般而言，这样的界面不会是有理晶面，而是由许多低指数的小晶面组成，即

$$\mathbf{p}' = \sum_i a_i \mathbf{p}_i' \qquad (3.43)$$

其中a_i和$\mathbf{p}_i'$分别为第i种小晶面的个数与法线矢量．在到此为止的讨论中，$\mathbf{p}'$或$\mathbf{p}_i'$作为法线矢量，均使用单位矢量，因为只是表面界面或不变面或晶面的空间方向．在这里，按照习惯，低指数的晶面要使用整数指数，即$\mathbf{p}_i'$应为诸如（100），（110）等低指数面，同时为了保持a_i为整数，则$\mathbf{p}'$也应为整数指数．在以下的讨论中，凡用整数指数的界面的法线矢量表为大写字母$\mathbf{P}'$，因而不再是单位矢量，而成为晶面表示法的Miller指数．这一情况示于图11(a)中，图（b）示出一个选作界面计算单元的体积，并设其中所包含的原子数为q．于是，在一个界面单元中，界面由小晶面组成的方式的总数为

$$\omega = \left(\sum_i a_i\right)! \Big/ \prod_i (a_i!) \qquad (3.44)$$

因而得到界面的组态熵（位形熵），也即是摩擦函数的准熵为

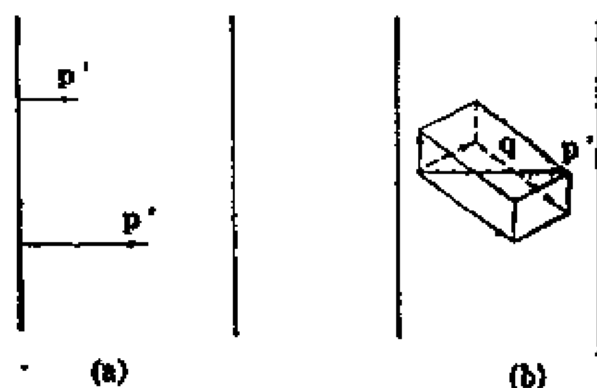


图 3.11 单位法矢p'和整数指数法矢p'以及界面单元

$$S_r=\kappa\ln\omega \quad \mathrm{J/(mol\cdot K)} \tag{3.45}$$

其中

$$\kappa=(K_b\cdot Na)/q \qquad \mathrm{J/(mol\cdot K)} \tag{3.46}$$

其中K_b是Boltzmann常量，N_a是Avogadro常数．可以看出，作为界面特征张量D的组成矢量之一的不变面法矢p'，对于确定准熵S_r起着重要作用（前面提到位移矢量d对确定准焓H_r起重要作用）．但是要在这里具体计算S_r，所存在的困难比估算H_r的困难要大得多，关键原因是（3.43）式的选择方式非只一种，甚至在设定p_i'后，a_i的选择也可能不止一种．此外，界面单元（含原子数q）如何选定也是很大的问题．从原则来说，界面厚度与矢量p'密切相关，如图3.12所示．而这些选择都大大地影响计算S_r的

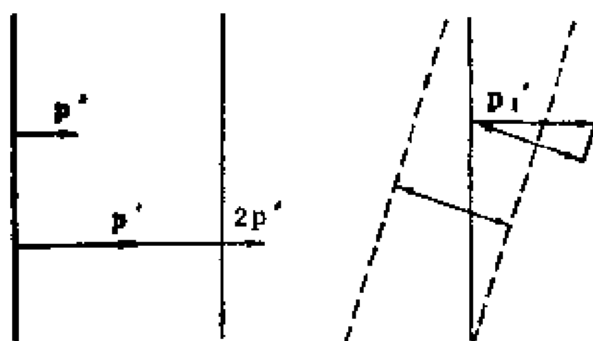


图 3.12 界面厚度和法矢p'

结果，相差可至几个数量级．因此，可以这样说，这里提出的，由低指数小晶面组成界面，组成方式总和所表现的组态熵，即为界面的摩擦准熵，这主要是一个定性的思路，要进行定量的计算，还需找出这一思路上的其它规律（限制条件）。但是另一方面，为了显示这一思路的确包含进行定量计算的潜力，在这里将人为地加上一些限制条件，然后来作定量的估算，尽量达到正确的结果，或正确的数量级。所加的限制条件诸如小晶面尽量选择{100}，{110}，…，等密排面，小晶面的排列达到最大的熵值，等等．这后一条件，给“高熵界面”的概念以更多的涵义．

现在以Cu-29%Zn-3%Al合金[25-27]为例，来估算S_r的值．这一合金的惯习面是{2 11 12}，于是

$$\mathbf{P}' = (2\ 11\ 12) = 2\ (100) + 11\ (010) + 12(001) \tag{3.47}$$

取
$$q = 2 \times 11 \times 12 \tag{3.48}$$

得
$$\kappa = 31.5 \tag{3.49}$$

从而可以由（3.45）式算出

$$S_r = 0.62 \quad \mathrm{J/(mol \cdot K)} \tag{3.50}$$

对比由文献[25]以及前节得到的 $S_r = 0.4765\ \mathrm{J/(mol \cdot K)}$，这一结果是大体合理的．

另一个可能的例子是Cu-Al-Ni合金，[18,19,37] 其不变面的法矢为

$$\mathbf{P}' = [-0.155216 \quad -0.683127 \quad 0.713615] \tag{3.51}$$

大致上近似于

$$\mathbf{P}' = (\bar{8}\ \overline{18}\ 14) \tag{3.52}$$

从而得到

$$S_r = 0.36 \quad \mathrm{J/(mol \cdot K)} \tag{3.53}$$

前面指出，由实验得到的$S_r = 0.4208\ \mathrm{J/(mol \cdot K)}$，因而这里的结果也是大体上合理的．

必须再次强调，这里的数值计算并不完善，也并不重要，重要的是这里的思路，或许有一定启发性，或许是深入探究界面摩

擦，探究界面组态熵的一个良好出发点。数值计算的不完善，首先表现在人为限制太多太明显，而真正的客观约束（规律性），可能存在于两个方面（至少如此）：一个是保证熵值极大值的泛函存在，如Olson-Cohen[16]引入的那种类型的泛函，从而能提供选择决定(3.43)式具体参数的条件；另一个可能的约束条件是界面的厚度，如果有一个判据能够大致估出相界面的厚度，则有可能有助于确定（3.43）和（3.44）式中的一些参数，例如界面厚度可能限定p′矢量的模的大小，或限定P′的绝对值最小的指数（例如在3—5以下）。由于考虑到这一思路或这一推理过程尚属新创，在其基础部分未得到证实或广泛承认以前，暂时不必走得太远，作过于深入的考察。

3.8 小　　结

马氏体转变的晶体学理论，以公式D＝RBS为表征，描述并确定了马氏体与母相的取向关系与惯习关系；马氏体转变的动力学理论，以公式D＝I＋dp′为表征，描述并确定了界面推移的摩擦$F_r=H_r-TS_r$；这两种理论，通过界面联系在一起，而定量地描述界面特征的参数，又是这一平面不变应变张量D．特征张量D对界面的描述，不是抽象的，而是具体表示了界面的晶体结构以及弹塑性应变状态。从推理的角度，晶体缺陷中的线缺陷由Burgers矢量描述，则作为面缺陷的马氏体和母相之间的界面，用一个特征张量来描述，是合乎逻辑的．这样一来，马氏体转变的晶体学理论与动力学理论通过张量D联系起来，成为一个统一的理论。而平面不变应变张量D，可以通过测定马氏体和母相的点阵类型和点阵常数、两相的取向关系，以及两相的惯习关系等得到．从上述情况可以看出，张量D在马氏体转变中起着何等重要的作用．

必须强调，在3.6节和3.7节中对H_r和S_r的计算是不够精确的，尤其是后者，显然还有一些未知的规律没有揭发出来．但

是，这两节却显示了定量计算的可能性，只需进一步的理论分析和更充分的实验数据．因而，从原则上说，H_f和S_f是可以分别由两种思路求得，一是从动力学实验如转变回线求出，另一是由晶体学测量如点阵常数、取向关系、惯习关系等求出．这两者可以相互比较并达到更深的理论认识．因此，本章的理论不只是定性的，而且可能是定量的理论．如果这些概念是正确的，则马氏体转变的大多数行为和表现，可以在一个统一的和理论的基础上得到解释和描述．

必须注意区别这两组概念：包含在摩擦函数中的摩擦准焓和摩擦准熵（H_f和S_f）．包含在转变引起的化学自由能变化中的焓变和熵变（ΔH和ΔS）．前面一组，即（H_f和S_f）只与相界面本身相联系，是不可逆热力学函数，遵循不可逆热力学规律．而后面一组，即（ΔH和ΔS）是与两相的结构和状态相联系，是可逆热力学状态函数，并遵从经典热力学的规律．

鉴于特征张量D在马氏体转变中的突出的重要性，在这里把它的作用归纳总结如下：

1．在形核过程中，张量D及其伴生张量（约化张量）$\Delta(r)$连续地分布在一个区域（X域）并形成一定弹性应变场（Y偶），各点的局域应变为$\Delta(r)$，积累的应变为D．形核过程就是$\Delta(r)$和D的出现、形成并最后归并为一对界面的过程．

2．D通过它的构成张量R，B和S起晶体学作用。转变的晶体学特点，诸如取向关系与惯习关系，均可由张量D定量地导出，正如晶体学理论在40年来非常成功地进行的那样．

3．D通过其构成矢量d和p′完成动力学的作用．大体上，位移矢量d决定了摩擦准焓H_f，而不变面法矢p′决定了摩擦准熵。H_f和S_f一起决定了因界面摩擦而消耗能量，转化为不可逆热耗散的大小，从而显示出转变循环的特点和转变热滞．

本书到此为止所建议的理论，可以归纳如下的逻辑体系：由实验测得的马氏体转变的回线和转变的熵变，可以决定转变的状态函数，从而得到体系的自由能函数、摩擦函数和动力函数，于

是转变的各种行为和特点均可确定。也可以从另一方面，也许是更为基本的方面来看待这个理论逻辑体系：由母相和马氏体的点阵结构和点阵常数，可以求得马氏体转变的平面不变应变；由这一应变的两个构成矢量，即不变面法矢p′和不变面位移矢量d，可以求得界面的摩擦准焓H_f和摩擦准熵S_f；于是摩擦函数、自由能函数及动力函数均可求得。这样的体系可以叫晶体学体系，前面的则可叫动力学体系，应该是等价的两种平行存在的方法。从原则上说，这种体系把热力学、动力学、晶体学和转变机理结合在一起，并可系统地求值。当然，这决不是说马氏体转变的全部理论点和计算方法都已解决，恰恰相反，还有许多环节是不完善的。但是，本书所论证的，是一个理论体系的骨架，尽管还需补充、修正和完善许多细节，但却显示了一种前景：马氏体转变的各种理论有可能联合起来，成为一种统一有效的系统理论，而其基础和前提，却可能是非常简单的，譬如说某个特征张量。

参 考 文 献

[1] M. S. Wechsler, D. S. Lieberman and T. A. Read, On the Theory of the Formation of Martensite, *Trans. AIME*, 197 (1953), 1503—1515.

[2] D. S. Lieberman, M. S. Wechsler and T. A. Read, Cubic to Orthorhombic Diffusionless Phase Change-Experimentaland Theoretical Studies of AuCd, *J. Applied physics*, 26 (1955), pp. 473—484.

[3] J. S. Bowles and J. K. Mackenzie, The Crystallography of Martensite Transformations I, *Acta metall.*, 2 (1954), 3, pp. 129—137.
The Crystallography of Martensite Transformations Ⅱ, *Acta metall.*, 2(1954), 3, pp.225—234.

[4] J. K. Mackenzie and J. S. Bowles, The Crystallography of Martensite Transformations II, *Acta metall.*, 2(1954), 3, pp. 138—147.

[5] B.A.Bilby, R. Bullough and E. Smith, Continuous Distributions of Dislocations, A New Application of the Methods of non-Riemannian Geometry, *Proc. Roy.Soc.*, A231(1955), pp.263—273.

[6] R. Bullough and B. A. Bilby, Continuous Distributions of Dislocations: Surface Dislocation and the Crystallography of Marten-

sitic Transformations, *Proc.,Phys. Soc.*, B69 (1956) pp.1276—1286.

[7] C. M. Wayman, Introduction to the Crystallography of Martensitic Transformations, The MacMillan Co.New York, (1964).

[8] F. Falk, Landau Theory and Martensitic Phase Transition, ICOMAT-82, Int. Conf.On Martensitic Transformations,Leuven, Belgium (edited by L. Delaey and M. Chandrasekaran), 1982, pp. 3—15. Martensitic Domain Boundaries in Shape Memory Alloys as Solitary Waves, *ibid.*, pp.204—208.

[9] F. Falk, Model Free Energy, Mechanics and Thermodynamics of Shape Memory Alloys, *Acta metall.*, 28(1980), pp.1773—1780.

[10] G. B. Olson and M. Cohen, Classical and Nonclassical Mechanisms of Martensitic Transformations, ICOMAT-82, Int. Conf. On Martensitic Transformations, Leuven, Belgium (edited by L. Delaey and Chandrasekaran), 1982, pp.75—90.

[11] N. Yasunaga, Y.Funatsu, S.Kojima, *et al.*, Ultrasonic Velocity Near the Martensitic Transformation Temperature, *ibid.*, pp.603—608.

[12] S. Koshimizu and W. Benoit, Internal Friction Measurements and Thermodynamical Analysis of a Martensitic Transformation, *ibid* pp. 679—684.

[13] G. Kurdjumov and G. Sachs, Uber den Mechanismus der Staha-rtung, *Z. Physik*, 64 (1930), pp.325—343.

[14] Z. Nichiyama, X-Ray Investigation of the Mechanism of the Transformation from Face-Centred Cubic Lattice to Body-Centred Cubic, *Science Repts.* Tohoku Imp.Univ. First Ser.,23 (1935), pp. 636—664.

[15] A. B. Graninger and A. R. Troino, Crystallography of Austenite Decomposition, *Trans. AIME*, 140 (1940), pp. 307—331.

[16] A. D. Mcquillan and M. K. Mcquillan, Titanium,Butterworths Scientific Publications, 1956 London.

[17] W. G. Burgers, On the Process of the Cubic-Body-Centred Modification into the Hexagonal-Closed-acked Modification of Zirconium, *Physica*, 1 (1934), pp.561—586.

[18] K. Otsuka, C. M. Wayman, K. Nakai, *et al.*, Superelasticity Effects and Atress-Induced Martensitic Transformations in Cu-Al-Ni Alloys, *Acta metall.*, 24 (1976), pp.207—226.

[19] B. C. Muddle And R. H. J. Hannik, Crystallography of the Tetragonal to Monoclinic Transformation in MgO-Partially-Stabilized Zirconia, *J. Am.Ceram. Soc.*, 69 (1986), No.7 pp.547—555.

[20] G. B. Olson and M.Cohen, Thermoelastic Behavior in Martensitic Transformations, *Scri.metall.*, 9 (1975), pp.1247—1253.

[21] G. B. Olson and M. Cohen, Reply to "On the Equilibrium Temperature in Thermoelastic Martensitic Transformations",

Scri., metall., 11 (1977), pp.345—347.

[22] H. C. Tong and C. M. Wayman, Characteristic Temperatures and Other Properties of Thermoelastic Martensites, *Acta metall.*, 22 (1974), pp. 887—896.

[23] H. C. Tong and C.M.Wayman, On the Equilibrium Temperature in Thermoelastic Martensitic Transformations, *Scri.metall.*, 11 (1977), pp. 341—343.

[24] J. Ortin and A. Planes, Thermodynamic Analysis of Thermal Measurements in Thermoelastic Martensitic Transformations, *Acta metall.*, 36 (1988), pp.1873—1889.

[25] Y. Deng and G.S.Ansell, Investigation of Thermoelastic Martensitic Transformation in a Cu-Zn-Al Alloy, *Acta metall.*, 38 (1990), pp. 69—76.
Boundary Friction for Thermoelastic Martensitic Transformations, *Acta metall.*, 39 (1991), pp. 1995—1999.

[26] 邓永瑞, G. S. Ansell, Cu-Zn-Al 合金中热弹性马氏体的高压电镜观察，金属学报，23 (1987), pp.A464—469.
热弹性马氏体的长大，金属学报，26 (1990), pp. A382—384.

[27] Y. Deng and G. S. Ansell, Thermoelastic Martensitic Transformation in Cu-Zn-Al Alloys, *J. of Materials Science*, 26(1991), pp. 5254—5260.

[28] V.M.Faires and C. M. Simmang, Thermodynamics, 6th ed., Macmillan Publishing Co.,Inc., New York, 1978, pp. 116—118.

[29] R. J. Salzbrenner and M. Cohen, On the Thermodynamics of Thermoelastic Martensitic Transformation, *Acta metall.*, 27 (1979), pp.739—748.

[30] I. Cornelis and C. M. Wayman, Experiments on Hysteresis in a Thermoelastic Martensitic Transformations, *Scri.metall.*, 10(1976), pp.359—364.

[31] C. M. Wayman, Some Recent Developments in Martensitic Transformations, Symposium on New Aspeects of Martensitic Transformations, JIM, Kobe, Japan. (1976), pp. 159—170.

[32] W. Arneodo and M.Ahlers, The Martensitic Transformation in β Cu-Zn, *Acta metall.*, 22 (1974), pp.1475—1480.

[33] J. Li and G. S. Ansell, The Effect of Thermal Cycling on the Thermoelastic Martensitic Transformation in a Cu-Zn-Al Alloy, *Metall. Trans.*, 14A (1983), pp.1293—1297.

[34] C. M. Friend, The Effects of Applied Stress on the Reversible Strain in CuZnAl Shape Memory Alloys, *Scri.metall.*, 20(1986), pp.995—1000.

[35] J. Baram and M. Rosen, The Thermoelastic Phase Transition in Au-Cd Alloys Studied by Acoustic Emission, *Phil. Mag.*, A 44 (1981), pp.895—903.

[36] A. Amengual, F. Garcias, F. Marco and C. Segui, Acoustic

Emission of the Interface Motion in the Martensitic Transformation of Cu-Zn-Al Shape Memory Alloy, *Acta metall.*, 36(1988), pp. 2329—2334.
[37] G. B. Olson and M. Cohen, Interphase Boundary Dislocations and the Concept of Coherency, *Acta metall.*, 27 (1978), pp.1907—1918.
[38] G. B. Olson and M. Cohen, Ann. Rev. Mater.Sci., A Perspective on Martensitic Nucleation, 1981, 11:1—30.
[39] G. B. Olson, Fine Structure of Interphase Boundaries, *Acta metall.*, 29 (1981), pp.1475-1484.
[40] M. Ahlers, The Martensitic Transformation, A Model, *Z. Metallkde*, 65 (1974), p.636—642.
[41] V.Raghavan and M. Cohen, A Nucleation Model for Martensitic Transformations in Iron-Base Alloy, *Acta metall.*, 20 (1972), pp. 333—338.
[42] V.Raghavan and M.Cohen, Growth Path of a Martensitic Particle, *Acta metall.*, 20 (1972), pp.779—786.
[43] S. Kajiwara and T. Kikuchi, Dislocation Structures Produced by Reverse Martensitic Transformation in a Cu-Zn Alloy, *Acta metall.*, 30 (1982), pp.589—598.
[44] S. Chakravorty and C. M. Wayman, Electron Microscopy of Internally Faulted Cu-Zn-Al Martensite, *Acta metall.*, 25 (1977), pp. 989—1000.
[45] S. R. Goodman, S. S. Brenner and J. R. Low, Jr, An FIM Probe Study of the Precipitation of Copper From Iron-1.4 at.Pct Copper, part I: Field-Ion Microscopy, *Metall. Trans.*, 4 (1973), pp. 2363—2369.
[46] T. Tadaki, T. Kakeshita and k. Shimizu, Electron Microscope Study of the Matrix-Martensite Interface, ICOMAT-82, Int. Conf. on Martensitic Transformations, Leuven, Belgium (edited by L.Delaey and Chandrasekaran), 1982, pp.191—196.
[47] D. Rios-Jara and G. Guenin, On the Characterization and Origin of the Dislocations Associated with the Two Way Memory Effect in Cu-Zn-Al Thermoelastic Alloys---I. Quantitative Analysis of the Dislocations, *Acta metall.*, 35 (1987), pp.109—119.
[48] A. J. Bogers and W.G.Burgers, Partial Dislocations on the{110} Planes in the B.C.C. Lattice and the Transition of the F.C.C. into the B.C.C. Lattice, *Acta metall.*, 12(1964), pp. 255—261.
[49] ASM, Metals Handbook, desk edition, Carnes Publication Service, Inc., U.S.A. 1985, pp. 7.3, 7.4, 7.13.

第四章 马氏体长大理论

4.1 引 言

马氏体长大的过程，就是相界面的推移过程，对这一推移过程的性质和处理，在前两章作了许多讨论。但是，马氏体长大所伴随的弹性能越来越大，这种因比容不同、形状变化以及界面共格等引起的体积弹性能，增长极快，影响马氏体长大过程中的行为，并最终导至马氏体片停止长大。因此，本章的马氏体长大理论，主要处理这种体积弹性能及其分布。弹性能的大小和分布取决于许多因素，其中之一是马氏体和母相两状态下的弹性常数。在不同相的状态下的弹性常数对弹性应变分布的影响很大，这一情况在Christian[1]和Khachaturyan[2]的书中有详尽的讨论。然而，本章的重点，将放在马氏体形状对弹性应变分布的影响上，因为考查的对象，主要是具有热弹性马氏体转变的体系，其中多数合金在母相和马氏体两状态下的弹性性质相近。本章将讨论马氏体转变引起的弹性能、马氏体片周围的弹性应变的分布、特别要详细分析和计算"生长前沿"的局域应变，并把这些与马氏体长大的行为联系起来。

马氏体转变引起的弹性应变和弹性能的计算将采用数值计算方法，理论基础是Eshelby[3-5]计算嵌入无限连续介质中的夹杂和马氏体片的弹性力学理论。按照这一理论，除马氏体片是圆球形或扁球形以外，其他形状是难于得到精确解的，这种解也不具有闭合形式。因此，本书将采用电脑作近似的数值计算，得到定量或半定量的结果进行分析。这样结果显示出一个主要的特点，即弹性应变的分布对马氏体片的形状极为敏感，并且有时决定了马氏体长大的行为，例如决定了是热弹性长大还是自发长大。弹

性应变分布的不均匀性，在马氏体长大中起十分重要的作用。

除弹性能外，母相和马氏体之间的界面能是影响马氏体长大过程的另一重要因素。然而，从理论上处理界面能要比处理弹性能稍为简单一些，因为前者可以看作常量（单位面积的界面能），而不管马氏体片的形状如何变化。但是，马氏体片的表面积与其形状有关。因面，马氏体片的形状的影响是双重的：影响总的相界面面积、影响弹性能大小、而尤其重要的是弹性能的分布。在长大过程中马氏体片的形状是不断变化的，这里将对不同的生长阶段分别讨论。

这一章的基本假定是：马氏体长大过程的行为，基本上取决于生长前沿的局域弹性应变能，而不取决于马氏体转变引起的总弹性能或平均弹性能。这样将能协调一致地解释许多观察到的长大现象。

4.2 马氏体长大过程

如第二章所指出，按照 Cu-29%Zn-3%Al 合金[6-8]中的马氏体转变回线和金相观察，转变过程可按$d(M\%)/dT$的变化分为三个阶段：上升阶段，大体上对应于 0—20% 马氏体量；常量阶段，大体上对应于20—70%马氏体量；下降阶段，大体上对应于70—100% 马氏体量。不同阶段表现不同的长大行为，因为弹性应变能取决于不同的长大条件。

4.2.1 第一阶段

在这一阶段中，马氏体在母相的广大空间中形核和长大。因而，马氏体片在晶体中各方向上自由地生长，各马氏体片间的相互干扰非常小。马氏体片的形状，相应地按其周围的能量条件和晶体学条件长大。马氏体片并不按任意方向长大，而是沿惯习面长大，惯习面通常是一个晶体学面族。对于Cu-29%Zn-3%Al合金[6-8]中马氏体长大的第一阶段，图4.1—4.3示出其示意图、金相

照片和电镜照片。可以看出，马氏体片的形状很难说是扁球片状，马氏体片的表面也很不光滑，是很粗糙并且崎岖不平的。尽管惯

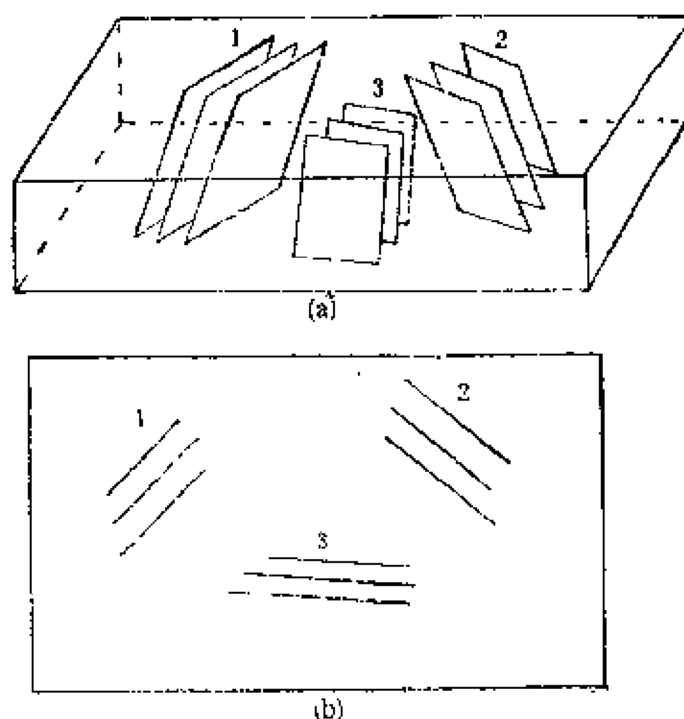
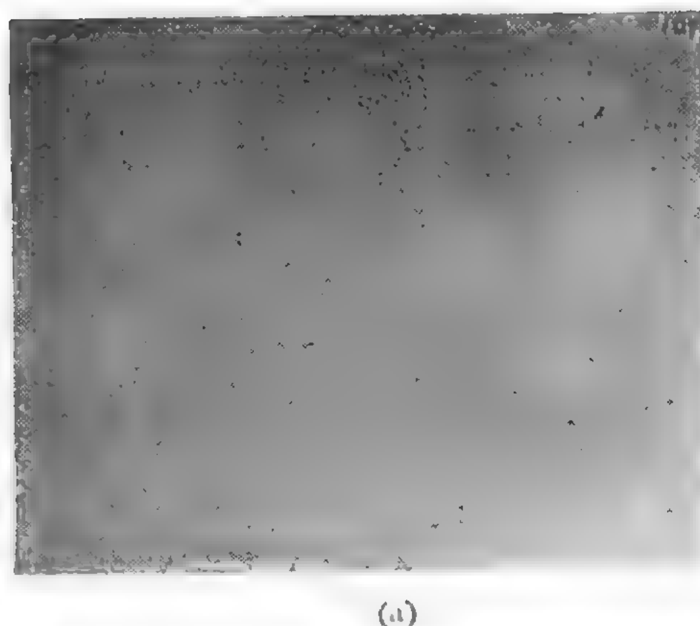
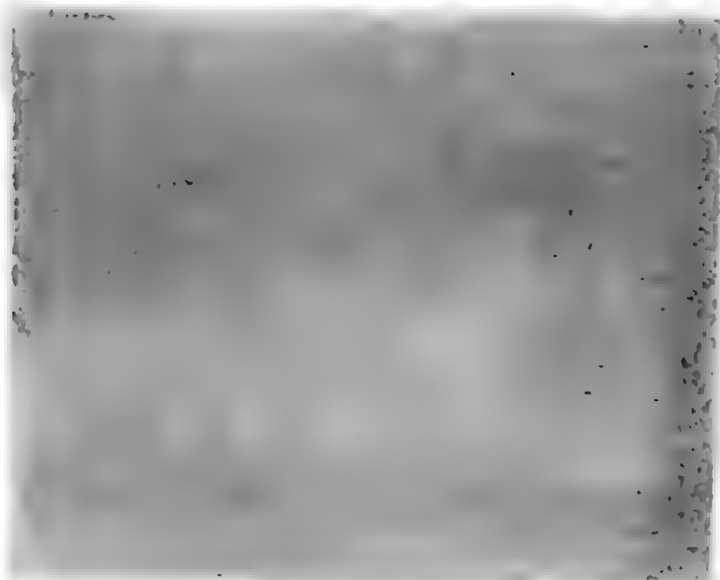


图 4.1 马氏体长大的第一阶段示意图（不同位向马氏体片按一定顺序出现，马氏体片1，2，3，为同一惯习面族不同位向的面）
(a) 立体透视图
(b) 观察面形貌

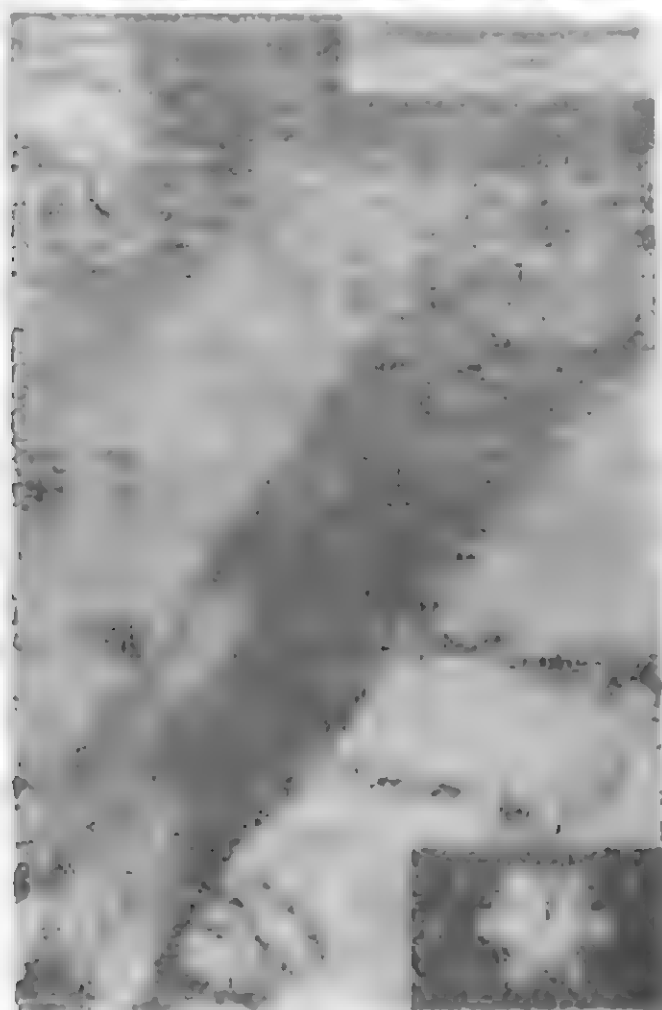


(a)



(b)

图 4.8 [illegible]
[illegible]



[illegible]
([illegible])

习面族中各不同位向面在晶体学上等价，但金相观察表明，平行于不同方向的马氏体片的出现，有一定的顺序，如表4.1所示，而且这个顺序在多次反复的转变中，并不改变。

表 4.1　不同位向马氏体片出现顺序

顺　序	测定角度	惯　习　面	迹　　线	算　得　角　度
1	90°	$(2\ \overline{11}\ 12)$	$[\overline{23}\ 10\ 13]$	90.0°
2	110°	$(11\ 2\ 12)$	$[10\ \overline{1}\ \overline{9}]$	109.6°
3	57°	$(11\ 12\ \overline{2})$	$[14\ \overline{13}\ 1]$	58.4°
4	42°	$(11\ \overline{12}\ 2)$	$[14\ \overline{9}\ 23]$	42.4°
5	0°	$(2\ 11\ 12)$	$[1\ \overline{10}\ 9]$	0.0°
6	22°	$(\overline{11}\ 2\ 12)$	$[10\ \overline{23}\ 13]$	20.4°

由于在这一阶段中各马氏体片的相互干扰可以忽略不计，因而可以对单片进行分析。在笔者及指导人的研究观察中发现[6-8]，马氏体片的径向和厚度方向的生长，都是热弹性的，即马氏体片的半径和厚度均在冷却过程中增大，而在加热过程中减小。自然，在这两个过程中均有热滞。这种长大过程中长大缩小行为，与Olson和Cohen[9,10]以及Ling和Owen[11]对热弹性马氏体转变的长大行为的描述是不同的。他们认为，马氏体的长大过程中，厚度方向的增大是按照热弹性的方式，而径向的长大是自发的方式。换句话说，按他们的观点，马氏体片的厚度在冷却过程中增大，在加热过程中减小，每一温度对应一定的厚度(可能加热过程对应的厚度与冷却过程中对应的厚度不同)，而马氏体片的半径，在任何M_s以下的温度都会自发地长大，直到遇到某种强大的阻碍(例如晶界)才会停止。这种半径生长方向的自发性，自然与经典热力学的可逆性不相容，并且与热弹性的平衡性也不相容。他们描述整个逆转变过程是这样的：在升温过程中，马氏体片减薄，但决不会缩短，当升至某一温度（A_f附近），马氏体片已非常薄，由于弹性失稳而突然消失。笔者曾多次反复观察Cu-29%Zn-3%Al合金的转变循环[6-8]，并未观察到上述弹性失稳导致马氏体片

突然消失的现象，无论是在100倍的金相显微镜下（看得十分清楚），还是在约5×10^4倍的透射电镜下（相对来说没有金相显微镜清楚，因伴随马氏体长大或缩小，均需不断调节焦距），只要冷却或加热足够缓慢，均能观察到马氏体片逐渐增长增厚，或者逐渐缩短变薄直到逐渐消失。上述的观察均是置试样于冷却加热载物台（可冷却至－140℃，加热至＋50℃）直接、连续、长期（70小时以上）、反复（转变周期多的达20次以上）地观察到的结果。这些观察毫无疑义地证明该合金中马氏体片的长大，不但在厚度方向，而且在半径方向都是热弹性地进行。

Olson-Cohen[9, 10]和Ling-Owen[11]主要是从理论上来论证马氏体长大过程中厚度方向的热弹性和半径方向的自发性。他们的论证大致如下：按Kaufman和Cohen[12]所表示的出现扁球片状马氏体的能量关系为

$$\Delta G=\frac{4}{3}\pi r^2c\Delta g_{ch}+\frac{4}{3}\pi rc^2g_e+2\pi^2\sigma_0 \qquad (4.1)$$

其中ΔG是因马氏体转变引起的系统的Gibbs自由能变化，r和c分别为马氏体的半径和半厚，Δg_{ch}和g_e分别为单位体积马氏体转变引起的化学自由能变化和弹性能，σ_0是单位马氏体表面积的界面能。基于这一扁球片形假定和Eshelby[3-5]的弹性理论，可得结论：单位马氏体转变引起的弹性能g_e为

$$g_e=A(c/r) \qquad (4.2)$$

其中A是一个常数。径向长大导致比值（c/r）下降，从而使单位体积马氏体转变引起的弹性能下降。因此，径向长大应自发地进行，直到遇到某种强大的障碍（例如晶粒界）为止，然后才开始厚度方向长大。由于厚度方向长大导致（c/r）增大，因而一个温度对应一定的马氏体片厚度，进一步增厚则需进一步过冷，以提供更多的相变驱动力。因此，厚度方向的长大是热弹性地进行。就笔者所知，这些结论均为理论上导出的，迄今未见实验证实的报道。按笔者的看法，进行这类实验观察（径向生长的热弹性或自发性，逆转变中马氏体片是否缩短或突然消失），并非十分困难。

上述的论证[9-11]和实验观察[6-8]之间的差异，可能来源于对马氏体片形状的假设．一个理想的扁球形马氏体片，会引起弹性能的均匀分布，而其他形状的假设，可能引起弹性能的不均匀分布，从而导致马氏体生长前沿的局域高应变能分布，并阻止了径向的自发长大

在这一阶段中转变回线斜率的增长可能有两个原因：一是冷却过程中有越来越多的马氏体核出现，参与了长大过程；另一个是（c/r）比值的下降，这不一定会导致径向自发长大，但可能使径向长大变得更容易，并从而有助于厚度方向的长大。

4.2.2 第二阶段

在这一阶段，很少观察到新的马氏体核出现．这一阶段的特点是自调节的变体组群(self-accomodating variant sets)的形成和推进，这个变体组是由(2 11 12),(2 12 11),($\bar{2}$ 12 11),和($\bar{2}$ 11 12)四个惯习方向的马氏体变体（variant）构成的。这种变体组被Schroeder和Wayman[13]详细地研究过。由于各变体引起的弹性能互相抵销一部分，因而一个组群引起的弹性能极低，这就是“自调节”的意思．这一长大过程的特征是自调节组群在第一阶段形成的平行马氏体片之间形成和推进，其示意图、金相照片及电镜照片示于图4.4,4.5和4.6中．非常明显，这种长大机理能够保持弹性能或界面能与温度或马氏体量成线性关

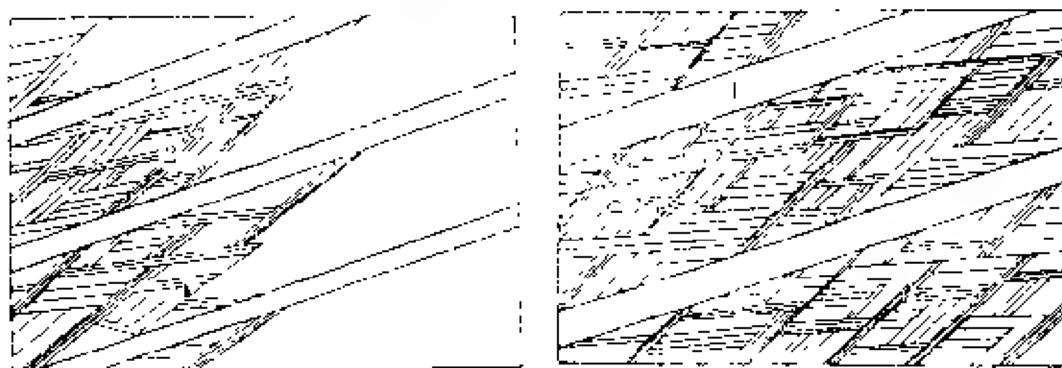
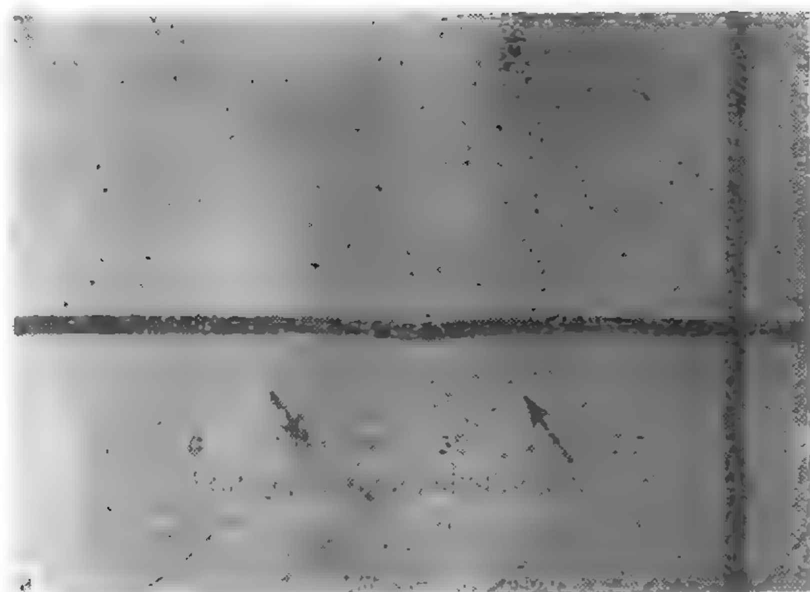


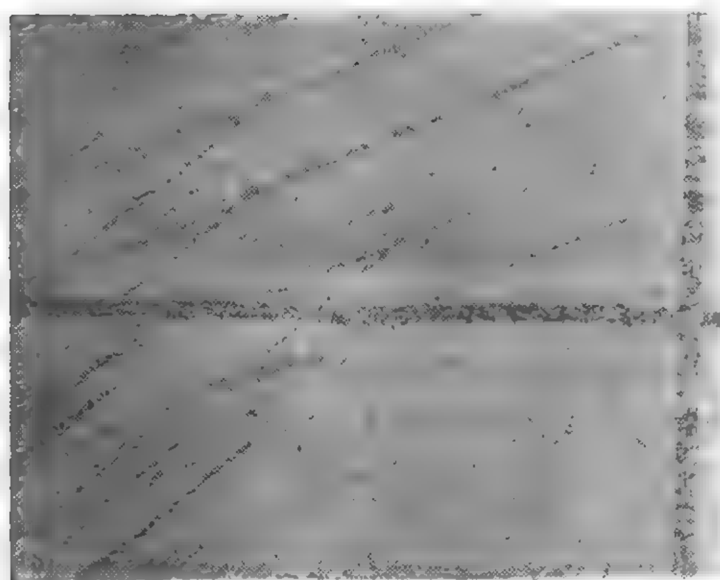
图 4.4 马氏体长大的第二阶段示意图

（自调节的马氏体变体片组群在早先形成的平行马氏体片之间推进）

系。事实上，转变回线在这一阶段也成线性，并在前两章论讨中处理过。Cu-29%Zn-3%Al合金的这个线性阶段较长（20—70%M），也有的合金体系的线性阶段较短。线性阶段的长短，似乎与晶粒大小有关。单晶试样表现出很长的线性阶段，甚至整个过程均线性[14]，而具有很长线性阶段的上述Cu-Zn-Al合



(a)



(b)

图 4.5 马氏体长大的第二阶段的金相观察
(自调节的马氏体变体片组群在早先形成的平行马氏体片之间推进，
黑十字为刻划的位置标记)
(a)236K (b)228K



图 4.6 马氏体长大的第二阶段的高压电镜观察
(电压1.2MV，温度238K)

金[6-8]，一块试样只有几个晶粒，因而晶粒是很大的，均为宏观尺寸。这种线性阶段长短和晶粒大小的关系，自然与转变引起的弹性能有关，晶粒越大，转变引起的弹性应力越小，分布也越简单。

在这个马氏体量与温度的线性关系的阶段来分离弹性和界面能，应该是比较容易的。从第二章的 (2.53) 和 (2.54) 式，可以得到

$$g_{el}\Omega + g_{in}\Omega = 12.49\Omega^2 + 26.4\Omega \qquad (4.3)$$

即

$$g_{el} + g_{in} = 12.49\Omega + 26.4 \qquad (4.4)$$

其中g_{el}和g_{im}分别为单位马氏体转变引起的弹性能和界面能，现

在虽然无法把这两项彻底地分开，但却可讨论每一种能量与马氏体量之间的关系.对于1 mol的物质，Ω是体积百分数，自然正比于马氏体的体积．因为单位面积的界面能是常数，则（4.3）式中1 mol物质的总界面能($g_{in}\Omega$)正比于马氏体的总表面积.对于一般的三维立体形状，表面积正比于体积的 2/3 次方。对于一些特殊的形状，如固定底面积的圆柱或固定高度的圆盘，其表面积正比于体积。一般而言，对于常见的规则形状，表面积不大会正比于体积的平方。因此，可以由（4.3）式推定；($g_{in}\Omega$)正比于Ω的一次方项，而弹性能($g_{el}\Omega$)是Ω的二次函数。或者换句话说，单位马氏体转变引起的界面能为常数，引起的弹性能是马氏体百分数Ω的线性函数

$$g_{el} = 12.49\Omega + (26.4 - g_{in}) \qquad (4.5)$$

这种分析与观察到的在平行马氏体片之间形成自调节马氏体变体片的组群，以及它的推进相一致.这种组群的表面积对单位马氏体转变明显地是一常数。这一数值通过对马氏体片的形状的适当假定后可以估出，从而可以决定弹性能g_{el}与Ω之间的线性关系。

4.2.3 第三阶段

这一阶段的特点是母相已被马氏体片分割完毕，因而新的马氏体只能在被分割包围的、处于应力状态下的母相区形核长大.相应的示意图、金相图和电镜图示于图4.7，4.8和4.9中。被分割包围的母相区域越来越小，马氏体的形核长大越来越困难。形核的困难来源于母相区太小，没有足够的空间出现形核所需的X域和Y偶（见第一章），因而能垒较高．长大的困难来源于径向生长被已形成马氏

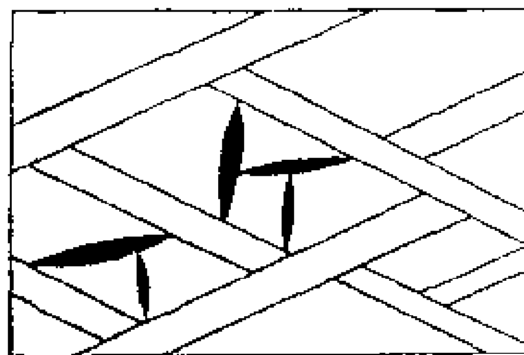
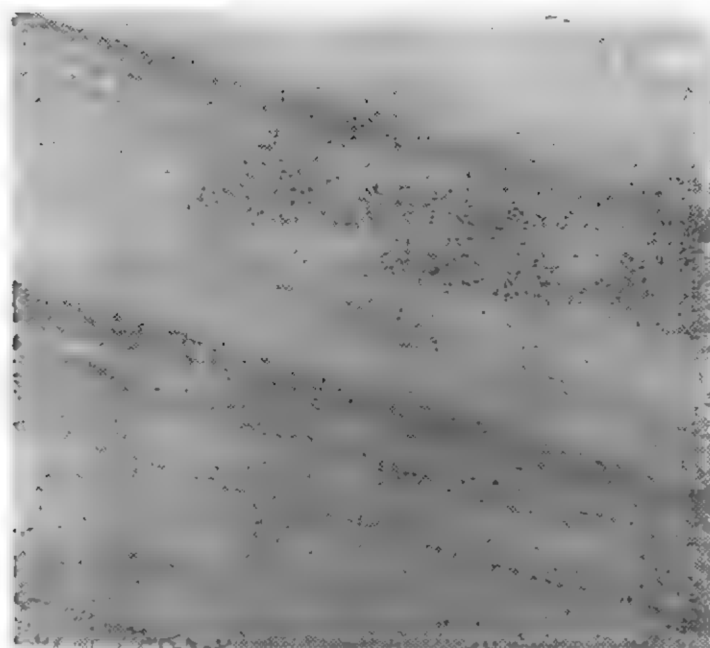
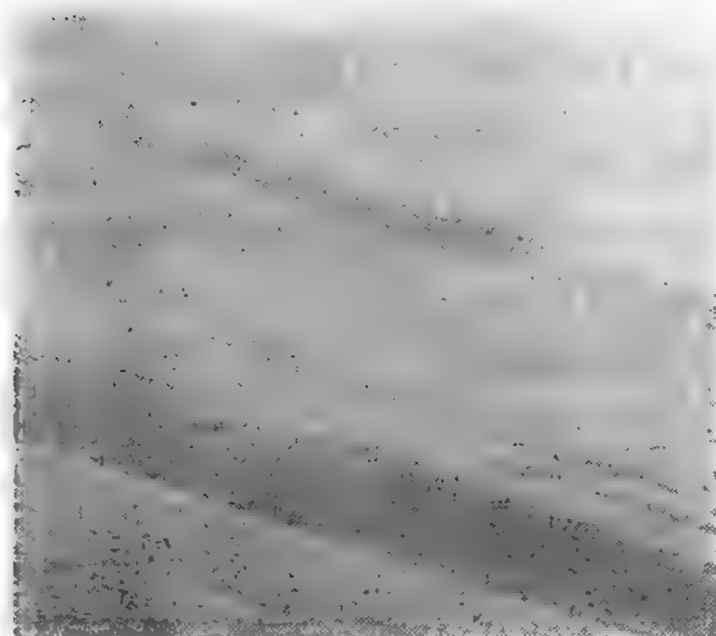


图 4.7 马氏体长大的第三阶段示意图（新的马氏体片在已被早先马氏体片分割包围的母相小区域中形核长大，黑片为第三阶段出现的新马氏体片，白片为早先生成的马氏体片）

体片的阻挡，不能有很大发展，而厚度方向长大引起的弹性能上升远快于径向生长所引起。从第三章的图3.4可以看出，第三阶段所占的温度范围很大，而相对地发生的马氏体的转变量较小。



(a)



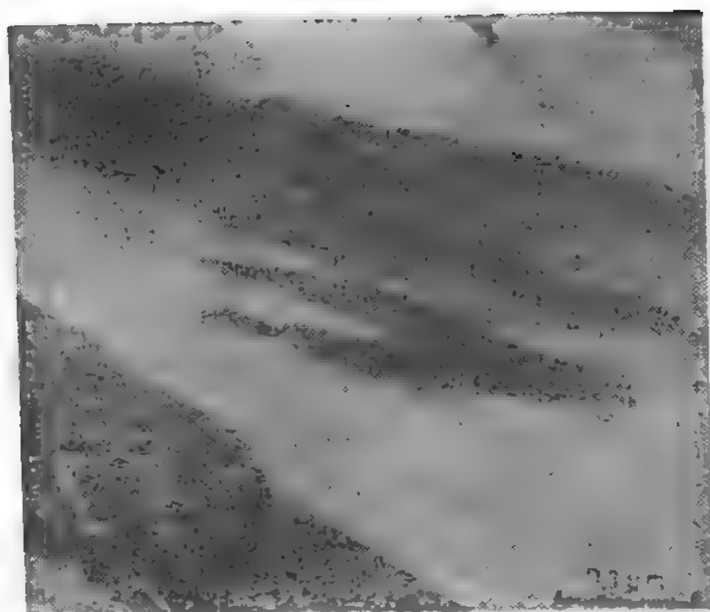
(b)

图 4.8 马氏体长大的第三阶段的金相观察（新的马氏体片在已被早先马氏体片分割包围的母相小区域中形核长大）
(a) 213K (b) 193K

转变回线在第三阶段的斜率下降可能有两个原因，一是被分

割的母相区越来越小，导致比值（c/r）（相对地）越来越大，从而使弹性能越来越高；另一原因是可能发生转变的体积越来越小，因而转变的马氏体量越来越少。

对转变的第二阶段在前两章有较多的讨论。线性阶段的唯象处理对另两阶段也是适用的，只需把所涉及的弹性能用非线性弹



(a)



(b)

图 4.9 马氏体长大的第三阶段的高压电镜观察（电压1.2MV，第三阶段出现在分割包围的母相小区域中在现的马氏体小片）
(a) 纵向小片 (b) 横向小片

性能代替线性弹性能即可．因而，对理论处理第一和第三阶段而言，关键是分析和计算弹性能在母相和马氏体中的体积分布。下面几节将要讨论这些分析计算的原理和具体的数值计算方法。

4.3 弹性能的计算

4.3.1 Eshelby的弹性理论

在本章中考查马氏体转变引起的弹性能时，把合金看作连续介质，而忽略其晶体学特点．按照Eshelby[3-5]的理论，共格地嵌镶于无限大母相的马氏体片所引起的弹性能，可以通过下面的虚拟步骤计算出来：

1．从作为连续介质的母相中取出一块小体积的材料；被取出的小块自由地转变为马氏体，这种转变从力学角度可以看作塑性形变，转变后不存在弹性应力。

2．施加一个表面力，使这块马氏体弹性地恢复原来的尺寸和形状（从晶体学的角度，此时仍为马氏体结构，只是处于弹性应力应变状态下）。

3．把这一块恢复形状的马氏体块放回母相原来挖出来的窟窿中，并把接缝焊死（为了保持共格，即位移的连续性）。

4．施加一个假想的，与第3步相反的表面力于接缝处，以去除第3步所施加的力。于是，马氏体的形状和表面均要相应地调整，从而在母相中引起弹性应力场、应变场和弹性能分布，而马氏体片内的应力和应变也要相应地改变。

通过这一系列虚拟步骤，所得到的结果，从力学角度看，应等价于母相内部发生转变并出现一片共格马氏体所引起的弹性应力场、应变场和弹性能分布的结果．现在按上面的步骤，列出每步的数学力学表达式．

1．取出的小块自由地转变为马氏体，相应的应变为e_{ij}^T。

2．为了恢复原来的形状和大小，所需施加的应力按Hook定律为

$$-\sigma^T_{ij} = -(\lambda e^T_{mm}\delta_{ij} + 2\mu e^T_{ij}) \qquad (4.6)$$

其中λ为Lamé常数，μ为切变模量。

3. 为了产生这个应力，需在表面施加的力之为

$$-df_i = -\sigma^T_{ij} dS_j \qquad (4.7)$$

其中dS_j为有方向的表面积元。

4. 把小块放回窟窿，并焊死，然后在焊面施加力元df_i以抵消$-df_i$，则此力元df_i在母相中r点引起的位移为$du_i(r)$

$$du_i(\mathbf{r}) = U_{ij}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')df_j(\mathbf{r}') \qquad (4.8)$$

其中

$$U_{ij}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi\mu}\frac{\delta_{ij}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} - \frac{1}{16\pi\mu(1-\nu)}\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \qquad (4.9)$$

其中$\mathbf{r}'$为表面力元df_j的位置矢量，ν为Poisson比。从面得到所有力元引起的$\mathbf{r}$点位移为

$$u_i^c(\mathbf{r}) = \oint\!\!\oint_s dS_k \sigma^T_{jk} U_{ij}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \qquad (4.10)$$

由Gauss定理

$$\oint\!\!\oint_s |\mathbf{r}-\mathbf{r}'| dS_k = \int_v \frac{\partial}{\partial x'_k}|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| dv$$

$$= \frac{\partial}{\partial x_k}\int_v |\mathbf{r}-\mathbf{r}'| dv \qquad (4.11)$$

得到

$$u_i^c(\mathbf{r}) = \int_v \sigma^T_{jk} U_{ij,k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') dv \qquad (4.12)$$

即
$$u_i^c(\mathbf{r}) = \frac{1}{16\pi\mu(1-\nu)}\sigma^T_{jk}\psi_{,ijk} - \frac{\nu}{4\pi\mu}\sigma^T_{ij}\phi_{,k} \qquad (4.13)$$

其中
$$\psi(\mathbf{r}) = \int_v |\mathbf{r}-\mathbf{r}'| dv; \quad \phi(r) = \int_v \frac{dv}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \qquad (4.14)$$

分别称为双调和函数和Newton势函数。上面使用了符号

$$\int_v \equiv \iiint_v; \quad \rho_{i,k} \equiv \frac{\partial \rho_i}{\partial x_k}$$

Newton势函数$\phi(\mathbf{r})$和双调和函数$\psi(\mathbf{r})$的具体形式依赖于马

氏体片的形状，在Eshelby 的理论中对此形状没有具体说明。事实上，只有当马氏体片是圆球形或扁球形时，ψ和ϕ才有闭合形式的表达式，在这种情况下对计算有很大的方便，这很可能是一些研究者采用马氏体片为扁球形这一假定的原因。但是，因为弹性应力和应变的分布对马氏体片的形状非常敏感，上述假设可能很大地限制了计算结果的应用范围。在本章中将不采用这一假定，从而ψ和ϕ不再有闭合形式，因而全部计算将采用电脑的数值计算方法。

4.3.2 计算方法

计算的模型如图4.10所示，在位置$\mathbf{r}$处的位移$u_i^c(\mathbf{r})$的计算方法如下：$\mathbf{r}'$处的力元在$\mathbf{r}$处引起的位移元为$u_{ij}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$，把此位移

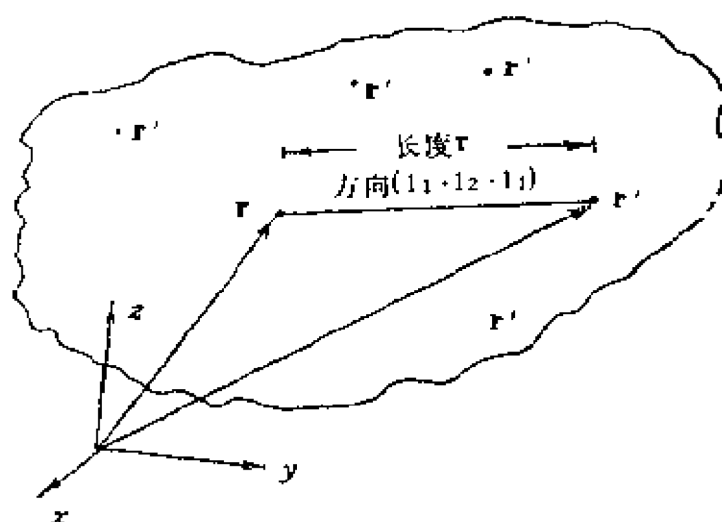


图 4.10 Eshelby求弹性位移示意图（各$\mathbf{r}'$点的力元在$\mathbf{r}$处引起的位移的总和，可用积分代替从而求得$\mathbf{r}$点的位移）

元积分，则得到$\mathbf{r}$处的位移$u_{ij}(\mathbf{r})$，而积分域遍及所有力元的位置$\mathbf{r}'$，这就是（4.12）式。为了找到一个便于数值计算的形式，把（4.9）改写为[3-5]

$$U_{ij}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')=\frac{1}{16\pi\mu(1-\nu)|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\left[\frac{(x_i-x_i')(x_j-x_j')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\right] \tag{4.15}$$

代入（4.12）式，得

$$u_i^c(\mathbf{r})=\frac{1}{8\pi(1-\nu)}e_{jk}^T\int_v\frac{dv}{r^2}g_{ijk}(\mathbf{l})\qquad(4.16)$$

其中

$$g_{ijk}(\mathbf{l})=(1-2\nu)(\delta_{ij}l_k+\delta_{ik}l_j-\delta_{jk}l_i)+3l_il_jl_k\qquad(4.17)$$

$$r=|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|=[\sum_i(x_i-x_i')^2]^{1/2},i=1,2,3\qquad(4.18)$$

$$\mathbf{l}=(l_1,l_2,l_3)\qquad(4.19)$$

$$l_i=(x_i-x_i')/r\qquad i=1,2,3\qquad(4.20)$$

因而r和l分别表r至r′连线的长度和方向余弦。

式子（4.16）—（4.20）非常便于写成电脑计算程序，对马氏体引起的生长前沿的弹性位移作数值计算。在此程序中，r′选为马氏体片内各点的位矢，r为生长前沿某一小区域的位矢，并把r′处力元引起的r处的位移元累加起来，以代替（4.16）式中的积分。这种处理正好是Eshelby法的逆过程，Eshelby正好是用积分来代替累加的结果。

在生长前沿地区，弹性应力、应变和弹性能，均可由求得的位移$u_i^c(\mathbf{r})$按弹性力学的标准方法得出。令e_{ij}^c表母相中的应变张量，则

$$e_{ij}^c=\frac{1}{2}(u_{i,j}^c+u_{j,i}^c)\qquad(4.21)$$

其中

$$u_{i,j}^c=\frac{\partial u_i^c(r)}{\partial x_j}$$

相应的弹性应力σ_{ij}^c可通过Hook定律由e_{ij}^c求出，形式与（4.6）相似

$$\sigma_{ij}^c=\lambda e_{ii}^c\delta_{ij}+2\mu e_{ij}^c\qquad(4.22)$$

其中λ为Lamé常数，μ为切变模量。于是得到生长前沿的一个小区域的弹性能为

$$E_c=\frac{1}{2}\int_v\sigma_{ij}^c e_{ij}^c dv\qquad(4.23)$$

积分范围仅为此小区域。在笔者的博士论文[14]中写出了这整个过程的计算程序，对弹性位移、应力、应变和弹性性能作了计算，计算结果能够自动地由计算机绘图。有关的细节和资料均在该论文中，此处将要引用一些结果，来讨论马氏体长大的行为。

4.3.3 基本假定

热弹性马氏体的长大行为和微观长大过程，基本上受长大前沿的小区域中的局域弹性应变能控制，而不是受单位马氏体转变引起的总弹性能、或各处弹性能的平均值所控制。这种生长前沿的小区域的尺度必须足够小，以显示弹性应变的不均匀性。但另一方面，这种小区域必须足够大，以含有巨大数量的原子，从而可以定义热力学函数，并满足连续介质假定这一条件（为了应用连续介质力学）。下面一节将具体计算这种生长前沿的小区域中的弹性能，并把这种小区域称为o–域。为了给出一个清晰的概念，这种o–域的尺寸可以这样来估计：在放大 100 倍的金相显微镜下，一个可被清楚鉴别的马氏体片大约为 50μm长，1μm 厚。在这种情况下考虑径向长大和厚度方向长大时，o–域的线尺度可以是50nm的数量级。这一尺寸相对于马氏体片来说很小，可以显示应变的不均匀性，另一方面，这个区域含原子数大于 10^6的数量级，可以定义热力学函数并应用连续介质的假设。当马氏体片长得更大时，定义o–域将变得更为容易。图4.11示出马氏体片和o–域的示意图。

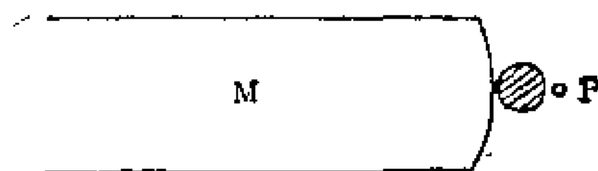


图 4.11 马氏体长大和生长前沿的 o–域的示意图

M：马氏体，P：母相，O：o–域

4.4 自由长大的弹性能

4.4.1 总弹性能

对于马氏体长大的第一阶段，马氏体片无阻碍地自由长大。长大过程引起的弹性能，取决于马氏体片的形状。Nabarro[15,16]导出此弹性能的表达式

$$\Delta E = \{2\mu(V_m - V_p)^2/3V_m\}E\left(\frac{c}{r}\right) \qquad (4.24)$$

其中V_p和V_m分别为母相和马氏体的比容，$E(c/r)$是一个由比值(c/r)决定的函数，在几种极端情况下的函数值为

$$E\left(\frac{c}{r}\right) = \frac{3}{4} \qquad \text{当马氏体不可压缩}$$

$$E\left(\frac{c}{r}\right) = 1 \qquad \text{当马氏体为圆球形} \qquad (4.25)$$

$$E\left(\frac{c}{r}\right) \approx \frac{3\pi c}{4r} \qquad \text{对于圆盘形且}(c/r) \ll 1$$

图4.12示出Nabarro计算结果。可以看出，单纯从降低弹性能的角度，马氏体趋向于成非常薄的片状。然而，有两个因素限制了这种趋势：一个是界面能，或者更准确地说，界面与体积的比值随马氏体片减薄而增加，于是共格界面能起突出的作用；另一

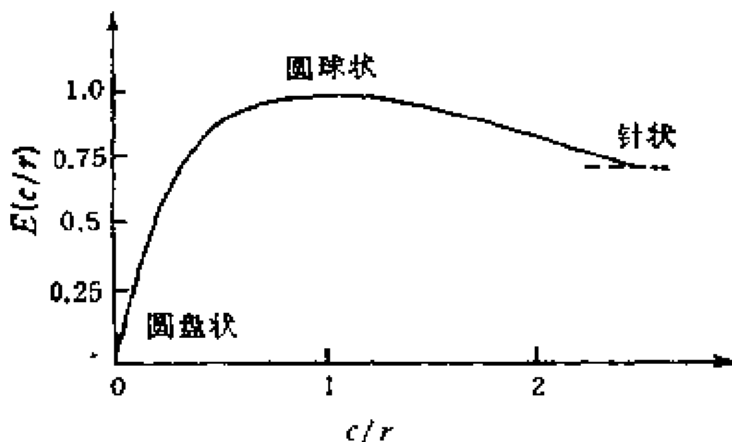


图 4.12 马氏体引起的弹性能与形状的关系（c为半厚r为半径[15]）

个是，片层减薄时，径向生长前沿的局部地区的弹性能，随(c/r)减小而上升，如后面将要论证。

为了与Nabarro的结果对比，现举一个二维马氏体片的例子，用4.3节的方法来计算弹性能。所得到的弹性能为总弹性或平均弹性能，即单位马氏体转变所引起的弹性能，这是Nabarro[16,17]和其他一些研究者[9-11]所算得的能量。本节中的计算用文献[14]中的程序，马氏体片的形状假设为渐近的扁球薄片，半径r，半厚c。因为只考虑二维形状，故马氏体片的宽度可看作一个单位，计算得到的结果示于表4.2中，可以看出，平均弹性能Ge受马氏体片的形状的影响是很大的。当马氏体片保持体积不变（因考虑二维情况，故此处的体积实为面积），Ge随(c/r)的增加而增大。

表 4.2 二维马氏模型的弹性能*

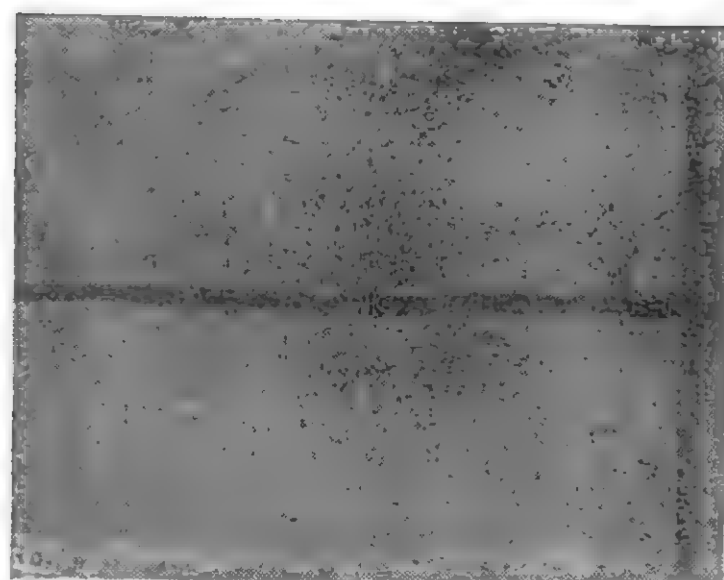
马氏体体积 V	比 值 C/r	平均弹性能 G_e
115	6/300	657.1
115	7/300	768.1
249	7/600	505.9

* 均为相对单位

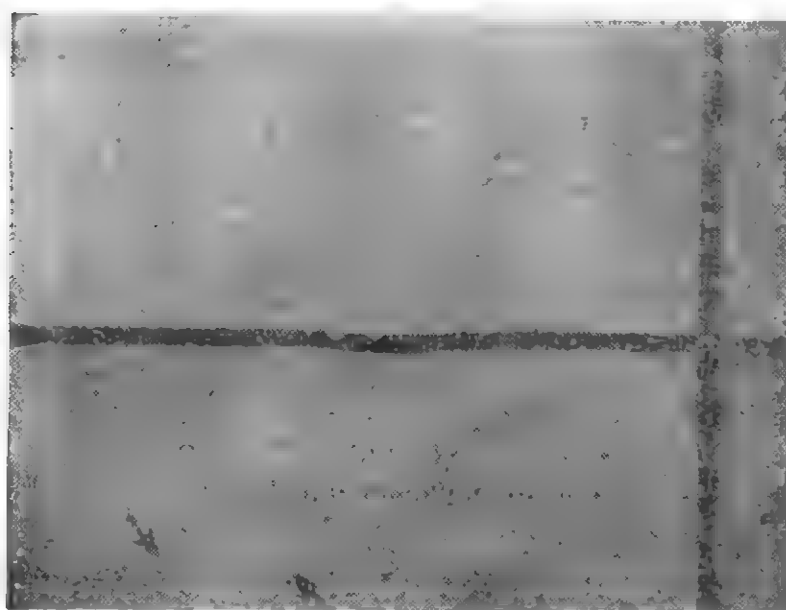
当体积增大一倍而(c/r)减至一半时，Ge反而稍有下降。这一结果与Olson-Cohen[9,10]和Ling-Owen[11]的结果是一致的。这将会导致径向的自发长大，与Cu-29%Zn-3%Al合金的观察结果不一致。图4.13示出两幅细心拍摄的照片，清楚地显示出径向长大的热弹性。因而，上述的不一致，可能来源于对马氏体片形状的假定以及伴随而来的弹性能分布的不均匀性。换言之，马氏体长大的行为，不是由总弹性能或平均弹性能控制，而是由生长前沿的o-域中的局域弹性能控制，如前一节所仔细阐明的。

4.4.2 局域弹性能

以下的计算假定马氏体为盘状薄片，如Wayman和Tong[17]



(a)



(b)

图 4.13 马氏体径向的热弹性长大（同方向箭头表同一马氏体片，100X）
(a) 241K (b) 242K

所假定，并具有弧形的圆滑边缘。关键之点是：所计算的能量，是单位马氏体转变在生长前沿的o-域中引起的弹性能，而不是单位马氏体转变引起的总弹性能或各点的平均弹性能，这一点差别是微妙的，但却是十分重要的。现在分别用 E_0^r 分别表示单位马氏体转变化径向和厚度方向生长前沿的 o-域中引起弹性能．请注意E_0^r或E_0^c不是整个马氏体片在 o-域中引起的弹性能，而是单位

马氏体转变在此域中引起的弹性能。

对E_0^r和E_0^c的计算结果示于图4.14和图4.15中。计算的

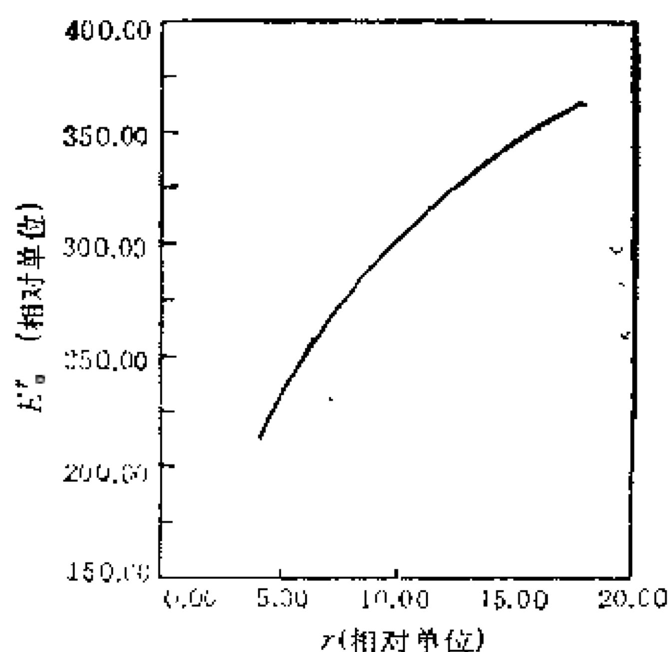


图 4.14 马氏体径向长大前沿的局域弹性能E_0^r随半径r的变化

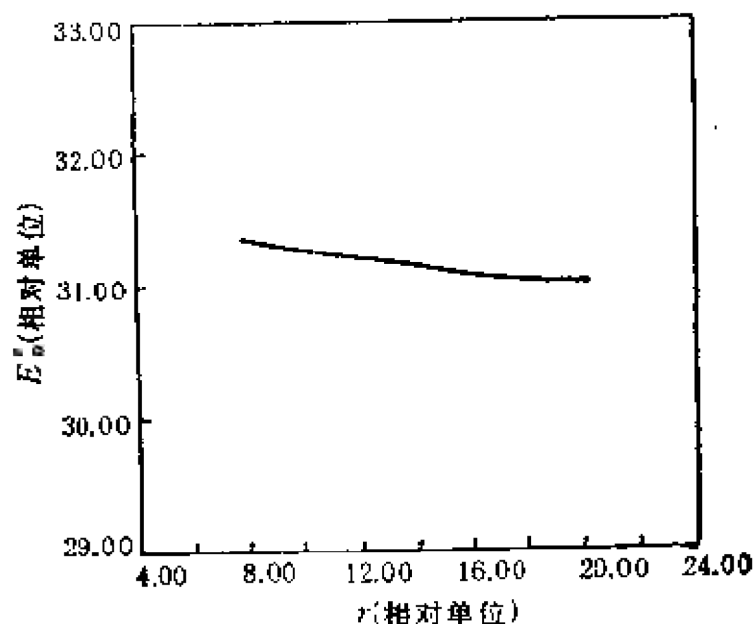


图 4.15 马氏体厚度方向长大前沿的局域弹性能E_0^c随半径r的变化

量很大（因把马氏体片划分为大量的小块），在IBM-3081上完成并自动绘图。因为计算的目的是比较弹性能的变化，因而所有单位均用相对单位。由图4.14可以看出，E_0^r随径向长大而上升，

即随半径增大而增大．然而在厚度方向长前沿的E_0^r却随径向长大而略有下降．这就是说，随径向长大，单位马氏体转变在径向生长前沿的局域弹性能上升，而厚度方向生长前沿的局域弹性能略有下降。因而，进一步的径向长大需要更大的过冷，以得到更大的相变驱动力，以克服增高的局域弹性能E_0^r。因此，径向长大应该是热弹性地长大，而不是自发长大。对于一个马氏体片，每一温度对应于一定的片长（即马氏体盘片的半径），冷却引起长大，加热引起缩小，这对径向和厚度方向的长大都是一样的。定性地说，这一结果与文献[6–8]中的观察是一致的，而与文献[9–11]的结论不同。图4.14中所示E_0^r和r之间的关系，可以表为下式

$$E_0^r=\rho+kr+\delta r^{1/2} \tag{4.26}$$

其中ρ，k和δ为常数，其值依赖于马氏体片的形状。

图4.15示出径向长大可降低厚度生长前沿的局域弹性应变能。换言之，径向长大促进厚度方向的长大，因而马氏体长大是在径向和厚度方向同时进行，这与大多数观察结果的报道也是一致的。

4.5 限制生长条件下的弹性能

4.5.1 厚度方向的长大

如前所述，马氏体长大第三阶段的特点是：在被早先生长的马氏体片分割包围的母相小区域内，出现马氏体核心并长大．这是一种受限制的生长，限制表现在两个方面：一是新的马氏体片是在原来马氏体引起的弹性应力应变场中生长，二是新出现马氏体片的长度，受已被分割成小块的母相区域尺寸所限制．由于这种限制的尺寸很小，新马氏体片迅速达到这种长度，然后在厚度方向长大，因而可以说是一个在固定长度下加厚的过程．对这种计算所得的结果示于图4.16，可以看出，在厚度生长前沿的局域弹性能（o–域内的弹性能）随厚度增加而迅速增加。这说明厚度方向长大是一个比径向长大更为困难的过程．正是因为这种困难，第

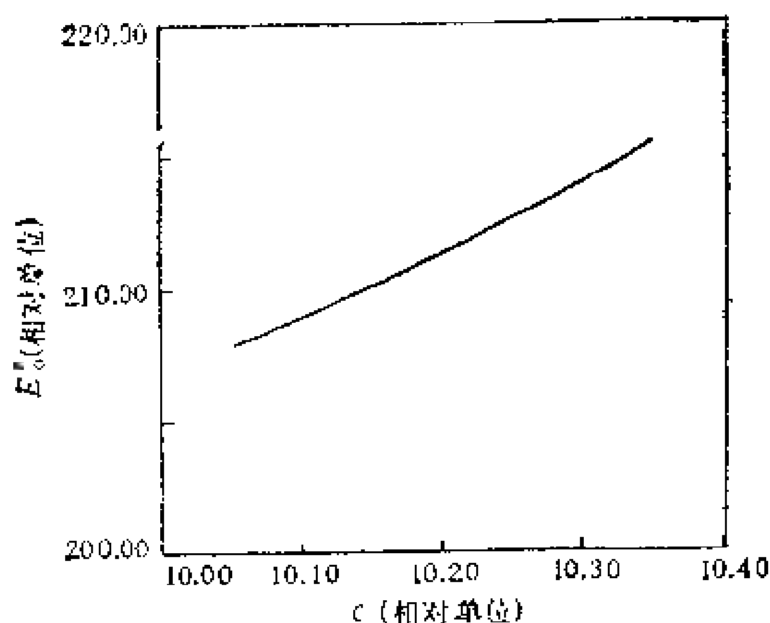


图 4.16 马氏体厚度方向长大前沿的局域弹性能E_0^c随半厚c的变化

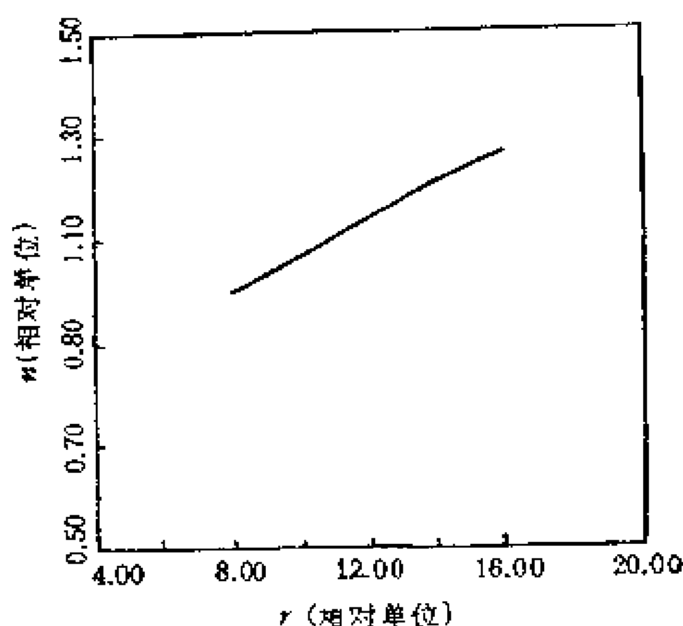


图 4.17 弹性能不均匀性n随半径r的变化

三阶段持续的温度范围较长，而相对地马氏体转变量较小。

4.5.2 弹性能分布的不均匀性

弹性能分布的不均匀性是马氏体长大的一个根本特征。最主要表现在径向生长前沿和厚度方向生长前沿的局域弹性能相差很大，而这种差异影响了马氏体长大的行为。作为整个体系，总的

弹性能趋向于最小，但长大过程的具体细节取决于局域的弹性能，而局域弹性能又取决于马氏体片的具体形状，这里几乎构成一个自封闭的循环作用体系。有时，为保持总弹性能最小所需的马氏体片形状，与局域弹性能不均匀性决定的长大形状，这两者可能不一致，于是马氏体片的形状必须不断地调整。为了显示局域弹性能的不均匀性，引入一个因子n，被定义为E_{e}^{r}/E_{e}^{z}。图4.17示出n随半径r变化的情况。可以看出，这种不均匀性随径向长大而加大。

4.6 分离弹性能

4.6.1 步骤

马氏体长大过程中引起的弹性能，是决定马氏体转变行为的一个重要因素。这种影响是双重的：总的弹性能（或者平均弹性能），作为体系的自由能的一部分，影响到系统的平衡态和转变方向；另一方面，局域弹性能，特别是生长前沿的局域弹性能，决定了显微长大过程，有时这又反过来影响宏观的转变动力学或金相形貌。本章到此为止，只强调并计算了局域弹性能，以解释径向和厚度方向的热弹性长大。

事实上，连续介质弹性力学的计算，即使用电脑的数值计算，很难把长大过程的各个方面考虑周全，同时得到足够的准确度和精确度，还不用说把晶体看作连续介质所必然带来的误差。因此，本章的计算，与其说是得到定量的结果，不如说是定性地解释一些长大行为。然而，或许存在一些更好和更简单的办法，来分析弹性能的总体特点。可能的方法之一，是把弹性能从转变回线或量热数据中分离出来。Ortin和Planes[18]深刻详尽地讨论了由量热数据分离弹性能的问题，并得到定量的结果。这种结果与弹性力学所得到的结果可以互相补充和完善。

基于马氏体的转变回线来分析弹性能，可按如下步骤进行：

1. 找出转变回线的冷却线段和加热段的中点，也即找出转变

的热力学平衡曲线，该曲线满足

$$C_0 - \frac{\partial}{\partial} \text{[illegible]} \tag{4.27}$$

2. 找出三条直线段来拟合C_0曲线的三个直线部分，即转变的三个阶段，这三条直线段的方程分别为

$$\begin{aligned} L_1 &= 0 \\ L_2 &= 0 \\ L_3 &= 0 \end{aligned} \tag{4.28}$$

这三个直线方程表示了长大过程三个阶段的主要部分，其中$L_2=0$也就是前两章的$L_0=0$的转变的线性部分。

3. 在三个直线段的过渡部分，给出两条光滑的曲线，来代替原来的折线，找出两个曲线方程来拟合这两段曲线

$$\begin{aligned} C_{12} &= 0 \\ C_{23} &= 0 \end{aligned} \tag{4.29}$$

图4.18示出这种分离的步骤。对于直线段的理论处理和计算，已在 4.2.2 中及前两章中讨论过，因此，下节只给出曲线部分分离弹性能的例子。

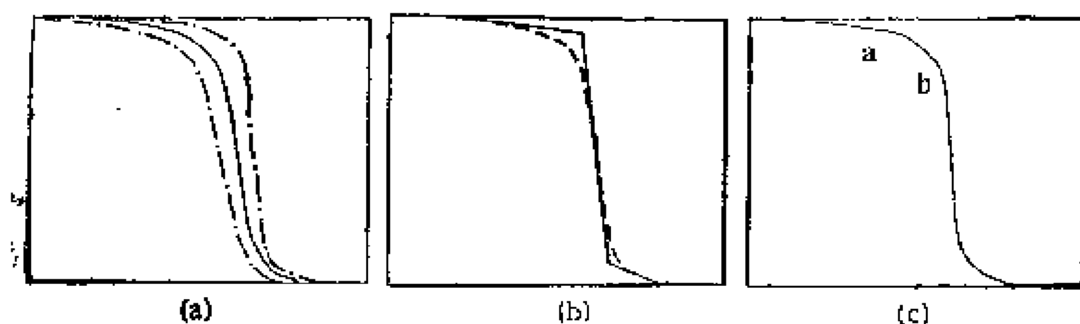


图 4.18 从马氏体转变回线中分离弹性能的步骤示意图

(a) 把回线中点连成一曲线

(b) 用三条直线来拟合这条曲线

(c) 用曲线段来拟合过渡部分

4.6.2 例子

作为上述分离弹性能步骤的例子，将对Cu-29%Zn-3%Al合金[6-8]进行计算处理。第一步，先给出转变回线的中点的连结线，以下的讨论仅涉及图4.18(c)的ab弧段，及相应的曲线 C_{23}。在ab弧段上找出5个点

点1	$T=222.5K$	$\Omega=0.92$	
点2	$T=225K$	$\Omega=0.91$	
点3	$T=227K$	$\Omega=0.90$	(4.30)
点4	$T=227.5K$	$\Omega=0.89$	
点5	$T=228K$	$\Omega=0.88$	

借助于最小二乘法的拟合，ab弧级可表为

$$T=a\Omega^2+b\Omega+c$$

$$a=-4375$$

$$b=7738$$

$$c=-3193 \qquad (4.31)$$

于是，热力学平衡态为

$$\frac{dF_s}{d\Omega}=T+4375\Omega^2-7738\Omega+3193=0 \qquad (4.32)$$

按第二章中的同样步骤，参考（2.53）和（2.54）式，可以得到

$$F_n=[T\Omega+\frac{1}{3}(4375)\Omega^3-\frac{1}{2}(7738)\Omega^2+3193\Omega]N \qquad (4.33)$$

其中 F_n 是用SI单位表示的自由能函数，N 是第二章引入的单位换算因子。按照第二章的讨论，F_n 也可表为

$$F_n=(1.612T-409.5)\Omega+(g_{el}+g_{in})\Omega$$

其中 g_{el} 和 g_{in} 分别为弹性能和界面能（单位马氏体转变引起），于是得

$$N=1.612 \qquad \text{J/mol} \qquad (4.34)$$

及

$$g_{el}+g_{in}=2350.8\Omega^2-6236.8\Omega+5147.1 \qquad (4.35)$$

于是

$$g_{el}=2350.8\Omega^2-6236.8\Omega+(5147.1-g_{in}) \qquad (4.36)$$

这个结果意味着两点，一是在这一转变阶段弹性能可表为马氏体百分数的二次幂函数，另一点是如果有理论或实验方法求得 g_{in}，则g_{el}立即可得到。

4.7 小 结

对于马氏体长大理论，主要的考虑是转变引起的弹性能。其他方面的情况，如晶体学、机理等，由形核过程定型，然后直接推演，因而本章未再作论述。从原则上说，似乎有两种方法来处理转变引起的弹性能，一是由弹性力学来计算，如Nabarro[15,16]和Eshelby[3-5]等所作的那样，另一是由实验数据中间接地分离出弹性能，如Ortin和 Planes[18]所作的那样。前一种方法因先进计算机的出现而有优势。但是，要建立一个模型，包含所有的影响因素（如晶粒方向、晶粒界、弹性各向异性、各相的弹性常数、马氏体片体片的形状和方向等），是非常困难的。但另一方面，第二种方法依赖于如何从实验资料中分析和分离弹性能，因为无法直接用实验方法测定弹性能。

马氏体长大涉及四部分能量，即化学自由能（或焓变和熵变）、弹性应变能、两相界面能，以及界面摩擦耗能。对化学自由能了解得比较清楚，并有不少理论和实验的方法进行计算或测量。直接测定界面能是困难的，但单位面积界面能通常被认为是常量，因而问题变为如何估计或计算界面积。弹性能的本质十分简单，易于了解，但定量的计算十分困难，或许是这四部分中最难于计算的。弹性能是热弹性马氏体转变的主要阻力之一，是逆转变的重要驱动力之一，因而对弹性能的理论计算或实验测定是马氏体转变的重要研究领域之一。界面推移的摩擦消耗能量，是整个马氏体转变能量学的一个小部分。然而，对界面摩擦的性质的了解和数值的计算，对深入了解马氏体转变的本质十分重

要。本书尽其所能对这些能量作了讨论。大多数的讨论尚属假设，仍需补充、完善或修正。最为重要的是精心设计和细心进行的实验，以获得越来越多的实验事实和结果，才能达到对奇妙的马氏体转变有更深刻的了解。

参 考 文 献

[1] J.W. Christian, The Theory of Transformations in Metalls and Alloys, second editions, Pergamon Press, Oxford, New York, 1975.

[2] A. G. Khachaturyan, Theory of Structural Transformations in Solids, John Willey and Sons, New York, 1983.

[3] J.D. Eshelby, Elastic Field of an Ellipsoidal Inclusion, and Related Problems, *Proc. Roy. Soc.*, A241 (1957), pp. 376—396.

[4] J.D. Eshelby, The Elastic Field Outside an Ellipsoidal Inclusion, *Proc. Roy. Soc.*, A252 (1959), pp. 561-569.

[5] J.D. Eshelby, Elastic Inclusions and Inhomogeneities, *Prog. Solid Mech.*, 2 (1961), pp. 87—139.

[6] Y. Deng and G.S. Ansell, Investigation of Thermoelastic Martensitic Transformation in a Cu-Zn-Al Alloy, *Acta metall.*, 38 (1990), pp. 69—76.
Boundary Friction for Thermoelastic Martensitic Transformations, *Acta Metall.*, 39 (1991), pp.1995—1999.

[7] 邓永瑞,G.S. Ansell, Cu-Zn-Al 合金中热弹性马氏体的高压电镜观察，金属学报. 23 (1987), pp. A464—469.
热弹性马氏体的长大，金属学报，26 (1990), pp. A382—384.

[8] Y. Deng and G.S. Ansell, Thermoelastic Martensitic Transformation in Cu-Zn-Al Alloys, *J. of Materials Science*, 26(1991) pp. 5254—5260.

[9] G.B. Olson and M. Cohen, Thermoelastic Behavior in Martensitic Transformations, *Scri. metall.*, 9 (1975), pp. 1247—1253.

[10] G.B. Olson and M. Cohen, Reply to "On the Equilibrium Temperature in Thermoelastic Martensitic Transformations", *Scri. metall.*, 11 (1977), pp. 345—347.

[11] H.C. Ling and W.S. Owen, A Model of the Thermoelastic Growth of Martensite, *Acta metall.*, 29 (1981), pp. 1721—1736.

[12] L. Kaufman and M. Cohen, Thermodynamics and Kinetics of Martensitic Transformations, *Prog. Metal Phys.*, 7 (1958), pp. 165—246.

[13] T.A. Schroeder and C.M. Wayman, The Formation of Martensite

and the Mechanism of the Shape Memory Effect in Single Crystals of Cu-Zn Alloys, *Acta metall.*, 25 (1977), pp. 1375—1391.

[14] Y. Deng, Doctoral Thesis, Rensselaer Polytechnic Inst itute, Troy, New York, U.S.A.1984.

[15] F.R.N. Nabarro, The Influence of Elastic Strain on the Shape of Particles Segregating in an Alloy, *Proc. Phys. Soc.*, 52(1940), pp. 90—93.

[16] F.R.N.Nabarro, The Strains Produced by Precipitation in Alloys, *Proc. R. Soc.*, A 175 (1940), pp. 519—538.

[17] H.C. Tong and C.M. Wayman, On the Equilibrium Temperature in Thermoelastic Martensitic Transformations, *Scri. metall.*, 11 (1977), pp.341—343.

[18] J. Ortin and A. Planes, Thermodynamic Analysis of Thermal Measurements in Thermoelastic Martensitic Transformations, *Acta metall.*, 36 (1988), pp. 1873—1889.

附录Ⅰ 马氏体转变的晶体学唯象理论

Ⅰ.1 概 述

马氏体转变的晶体学唯象理论，是材料科学中为数不多的定量理论之一，所研究的对象是马氏体转变后，马氏体和母相相间的晶体学关系，即点阵类型、点阵常数、点阵的取向关系、新相的惯习关系、两相界面的位向等。“唯象理论（phenomenological theory)”有两方面涵义，一是指此理论有一定普遍性，适用于多数或大多数材料系统中的马氏体转变，而不只是仅限于几种特定材料中的马氏体转变；另一方面是指这种理论只是现象之间的联系，不涉及对象系统的原子过程等细节。在物理中最为驰名和成功的唯象理论有Fourier的热传导方程、Fick扩散定律等。它们有极大的普适性，但不涉及原子细节。

马氏体转变的晶体学唯象理论，是由Wechsler，Lieberman和Read [1,2] 以及Bowles和Mackenzie [3-5] 最早分别独立提出的。以后Bilby和 Bullough等 [6,7] 从界面位错的概念出发，也得到大体相同的结果。理论内容的主要部分，已系统地叙述于Wayman的专著中 [8]，鉴于有关的中文资料不多，为了阅读本书读者的方便，把这一晶体学唯象理论扼要地介绍于此附录中。撰写时参考和引用了上述文献，特别是文献 [8]。

自这一唯象理论提出后，在近40年期间中，有大量实验证实，因而获得了巨大成功。自然也有与此理论不符合的实验结果，即使符合的，也常带有不同程度的误差。这或许正是材料科学中的规律与数学或物理学中的定律的不同之处。作为一个实验性的学科，一个以归纳为主、演绎为辅的技术基础理论学科，材料科学中的概念和规律，往往有明晰的核心内涵，但却只有一个

意义含糊、界限不分明的广阔外延。因而，在核心内涵处应用或检验这些概念或规律应是正确的、肯定的、甚至是定量的，而在外延处则应持适当的警觉和保留，并详加辨析。

在上述三个理论中，前两者，即W-L-R理论与B-M理论基本上等价。等价是指两者的出发点和推理过程相近，所得到的定量结果可能完全符合。所谓"基本上"是指在B-M理论中，允许有一个微小的膨胀作为调节因子，而W-L-R理论中没有。目前，提及马氏体转变的晶体学唯象理论，通常是指这两种基本等价的理论。

Bilby,Bullough和Smith的理论[6,7]约晚于上述理论两年，建立在完全不同的基点上。他们先提出"连续分布位错"的概念作为位错理论手段之一，目的是处理一些位错参与的过程，如形变、相变等。就笔者所知，这方面后来并未得到太大的发展，原因之一可能是因位错是晶体中的真实点阵缺陷，处理为连续分布与真实情况不符。另一可能的原因是引入的概念过于抽象和艰深，如伴随连续位错的假设而来的、抽象的位错空间，是一个比相对论中的Riemann空间还难懂的non-Riemann空间，其特点是该空间的局域曲率张量（curvature tensor）不为零、而且局域挠率张量（torsion tensor）也不为零，并与连续位错的局域Burgers矢量相联系。这种处理，似乎把较简单直观的问题复杂化了，使一些对微分几何不太熟悉的材料科学工作者望洋兴叹。幸而，他们在用"界面位错（surface dislocation）"的概念处理马氏体相变时，只涉及二维曲面，连续位错的概念较易理解，数学处理也比较简单。这种处理的结果可能与B-M和W-L-R理论的结果相同，而计算的方法和步骤，则完全不同。在一些合金体系中，也发现两者所得的结果有不同之处，如Ti-Mn合金[9]。目前按一般的理解，唯象理论主要指B-M理论和W-L-R理论，而在本书中，还包括"界面位错"理论在内。

由于唯象理论出现初期所显示的成功，人们期望它能说明马氏体转变的机理、即原子运动过程。但很快就认识到，在唯象理

论中所作的数学分解，决不代表过程的实际步骤，因而理论只有"唯象"的意义，不能说明转变的机制或原子过程，只规定了转变前后两相的晶体学关系。

Ⅰ.2 基本命题

马氏体转变的晶体学唯象理论，是建立在下述的假设前提上，也即理论的基本命题：马氏体转变是通过一个平面不变应变来完成的，这一平面不变应变D可以分解为一个旋转R，一个Bain畸变B，和一个简单切变S，即：

$$\mathbf{D}=\mathbf{R}\ \mathbf{B}\ \mathbf{S} \qquad (Ⅰ.1)$$

式中大写黑体字表张量，为3行3列矩阵。D为平面不变应变张量，即在此种应变前后，必存在一个不转动不畸变的平面，并一定可表为

$$\mathbf{D}=\mathbf{I}+\mathbf{d}\ \mathbf{p}' \qquad (Ⅰ.2)$$

其中I为单位矩阵

$$\mathbf{I}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix} \qquad (Ⅰ.3)$$

d为不变面的位移矢量，表为一个列矩阵

$$\mathbf{d}=\begin{pmatrix}d_1\\ d_2\\ d_3\end{pmatrix} \qquad (Ⅰ.4)$$

而p′为此应变的不变面的法线矢量，表为一个行矩阵

$$\mathbf{p}'=[p_1 p_2 p_3] \qquad (Ⅰ.5)$$

本书中的矢量用小写字母的黑体字表示。因此，一个平面不变应变由不变面和其位移完全并唯一地决定。反之，一个平面不变应变也完全并唯一地决定了它的不变面和位移。R是一个旋转张量，为正交矩阵

$$R=\begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} \\ r_{21} & r_{22} & r_{23} \\ r_{31} & r_{32} & r_{33} \end{bmatrix} \qquad (\text{Ⅰ}.6)$$

其中各列元素服从正交归一条件，即

$$r_{ki}r_{kj}=\begin{cases}1, & i=j \\ 0, & i\neq j\end{cases} \qquad (\text{Ⅰ}.7)$$

$$i, \ j, \ k=1, \ 2, \ 3$$

本书采用Eienstein约定，即重复出现的下标取1至3 的 求和。因而R只有3个独立变量。B为广义的Bain畸变张量，为转变前后在主轴坐标系统中的单纯膨胀或压缩，为一个对角矩阵

$$B=\begin{bmatrix} \eta_1 & 0 & 0 \\ 0 & \eta_2 & 0 \\ 0 & 0 & \eta_3 \end{bmatrix} \qquad (\text{Ⅰ}.8)$$

S为一简单切变张量，可表为

$$S=\begin{bmatrix} 1 & \tau & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad (\text{Ⅰ}.9)$$

这个矩阵的行列式等于1，即应变后没有膨胀 或 压缩，只有单纯的切变。

由（Ⅰ.1）式所表示的马氏体转变的晶体学唯象理论，把转变前后的晶体学要素联系起来，使之受到一定的约束，从而能由一些晶体学参量推导出另一些参量。事实上，（Ⅰ.1）式代表9个独立的方程，而其中含有15个独立的变量，从而使我们能在已知6个变量的情况下，计算出另外的9个变量。最广泛的一种应用，是由已知的马氏体及母相的点阵类型和点阵常数，来计算马氏体的惯习面、点阵取向关系及界面的空间位向等等。

对前述的基本命题，必须作两点很重要的说明.第一，马氏体转变通过平面不变应变完成，这里的平面不变应变，是从高出原子尺度几个数量级的平均尺度而言。换言之，从原 子 尺 度 来衡

量，这一应变不一定满足平面不变应变的条件，但从较大尺度平均来看（许多文献称为macroscopic，但其实不必须是肉眼可见的宏观范围，光学显微镜能观察到的尺度已足够大），是满足平面不变应变条件的。事实上，唯象理论指明，在（Ⅰ.1）式右端，(RB)这两因子乘积所表示的应变应是原子尺度均匀的，它们构成一个直线不变应变。因这一应变决定了点阵类型的变化，故又称为改变点阵的应变。而S则是不均匀的，表现的物理效果为滑移或孪生，均不改变点阵类型，故又称为不改变点阵的应变（点阵不变应变），其作用只是与（RS）这一均匀的直线不变应变一起，构成马氏体转变所必须的（平均的）平面不变应变。

第二点要说明的是，在唯象理论中，把控制转变的平面不变应变，分解为一个转动、一个Bain畸变、一个简单切变，这种分解只是一种数学处理，而决不表示转变过程的步骤，决不是说转变开始于简单切变，继之以Bain畸变，然后再旋转。这种过程不但没有任何实验根据，而且理论上（从能量角度）也不合理。因此，唯象理论只说明转变前后的晶体学关系，不涉及转变过程中的关系。但从另一方面来说，以B-M理论和W-L-R理论为主体的唯象理论中，能分解出的简单切变S，当表现为孪晶时，是可以实验测定的。同时Bullough和Bilby理论中，当界面位错为位错线墙的特例时，其运动所表现的界面推移，也即位错滑动，部分地描述了马氏体转变的机理。这种位错滑动所表现的简单切变，当以孪晶形式出现时，也是可以计算又可以观测的。因此，（Ⅰ.1式）中的简单切变S，不仅是一个数学手段，而且也是一个物理实在。但就整体而言，理论仍是“唯象”的，只处理转变前后的晶体学关系。

现在对唯象理论作一些解释。这个理论的依据来源于实验研究结果，即马氏体转变总有一个惯习面，一般来说就是马氏体与母相的界面。而这个界面又被实验确定有共格关系，即界面的原子排列既属于母相的原子排列，又属于马氏体的原子排列。那么这个界面在马氏体转变过程中必然不转动（否则就没有惯习面），

不畸变（否则不能共格，当然这里都被理想化了），因而马氏体转变受这一条件的强烈制约，转变只能是平面不变应变。这是为了与实验结果一致，并非什么更基本的理论导出的结果。自然，这里指的不转动不畸变，均指的是“宏观”平均而言，而不是从原子尺度的数量级。把这种宏观平均结果，进行绝对化和力学化，就出现平面不变应变的概念。另一方面。马氏体的结构和母相不同，必须进行某种“应变”才能相互转变，这种应变必须将两种点阵结构联系起来：作为弹性介质，这种应变把母相的形状、体积，变为马氏体的形状、体积；作为晶体，这种应变移动原子位置，使母相点阵成为马氏体相点阵，从而两种阵点形成一种“对应性”，这种应变就叫Bain畸变。但是 Bain 畸变并不是平面不变应变。因此，可以这样说，马氏体转变的平面不变应变必须含有Bain畸变这一因子，但还必须再加别的应变，以合成平面不变应变，才可能表征马氏体转变。很易得知，Bain畸变作为一个主应变，若再经旋转和简单切变，就可能成为平面不变应变。这只是“可能”，不是“一定”，取决于Bain畸变的特点（见附录Ⅰ，Bain畸变矩阵必须同时具有正的和负的实数本征值），如果确实可以构成一个平面不变应变，则可能有此马氏体转变存在。两个新的因子中，旋转不改变点阵类型，因而不影响Bain畸变所生成的马氏体点阵。但简单切变若均匀地发生，则破坏了Bain畸变所生成的马氏体结构。因而，此时的情况是，必须简单切变以得到平面不变应变，又不能改变已得到的马氏体结构。同时满足这两条的唯一的可能性，是这种简单切变不均匀地发生，例如滑移或孪生。因此，马氏体转变的平面不变应变，由均匀的Bain畸变（得到马氏体结构）、均匀的旋转、和不均匀的简单切变（后二者为了保持不转动不畸变的面）构成。

现在用图Ⅰ.1说明一个圆形球体经过Bain畸变后成为椭圆扁球的情况。圆球所受到的应变在x'_1和x'_2轴方向为拉伸，x'_3轴方向为压缩，因而对角矩阵B的两个矩阵元大于1而另一个小于1。在此应变后，AC直径变到A′C′，发生旋转，但长度未变，而其他多

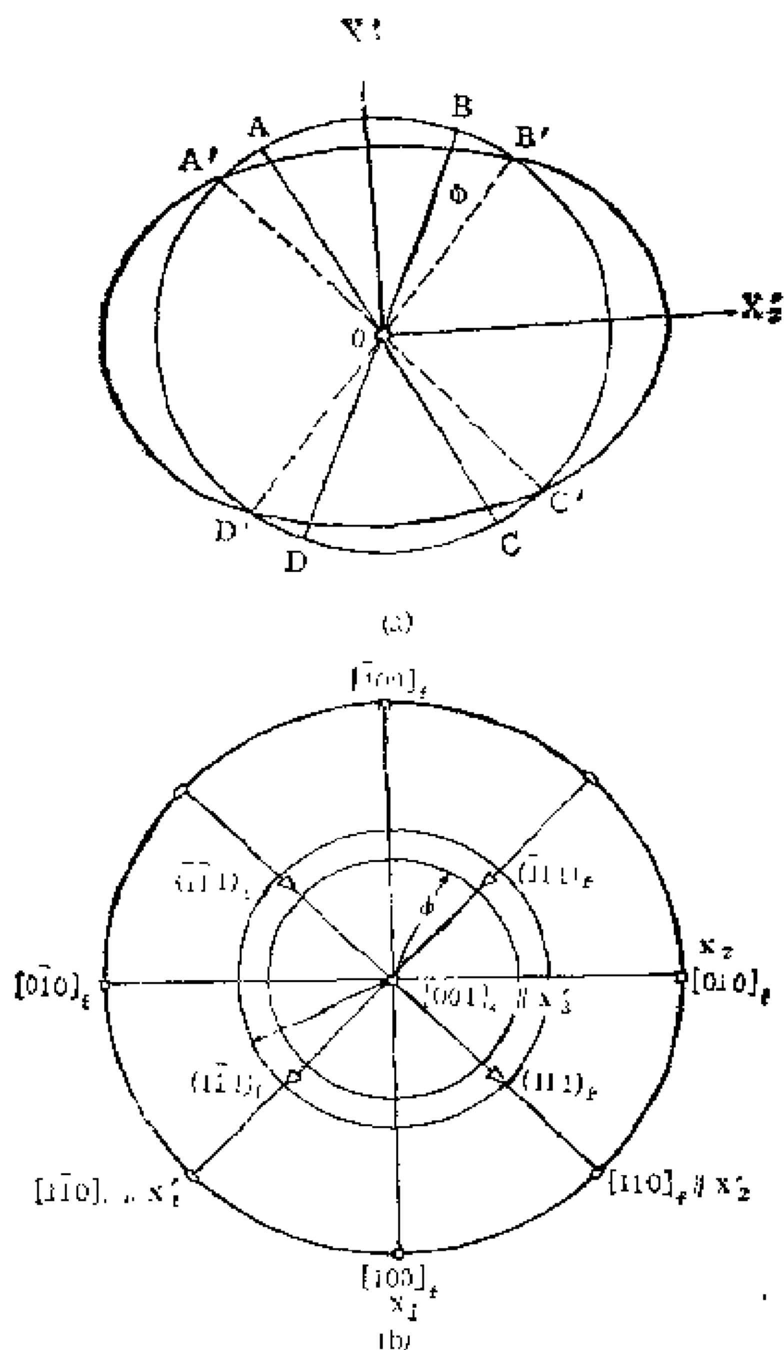


图 I.1 Bain畸变下的长度不变的线段构成的锥面[8]

(a) 立体示意图 x_1' 轴垂直纸面

(b) 极射投影图f.c.c—→b.c.t

数的直径都是伸长或缩短，同时发生转动。自然也有不转动但长度变化的直径，如x_3'轴。对于AC这种长度不变的直径有无限多根，即圆球面与扁球面的交线上的点穿过球心联成的。如果把扁球旋转，使A′C′转回并重叠于AC，则经Bain畸变和这一旋转（是以垂直纸面的 x_1' 为轴的）两次应变的合成应变，AC是一根

不旋转不改变长度的线段。如果这一旋转能形成两根类似AC这种线段，而这两线段又不平行（不共线），则这两线段所决定的平面就是不旋转不畸变的不变面。然而，在一般情况下，不会同时得到两根不共线的不变线段。此时，只能在保持已找到的不变线段的条件下，再作简单切变，则很可能找到另一根不变线段。

图 I.2示出简单切变的情况。圆球的上半部分发生均匀的简

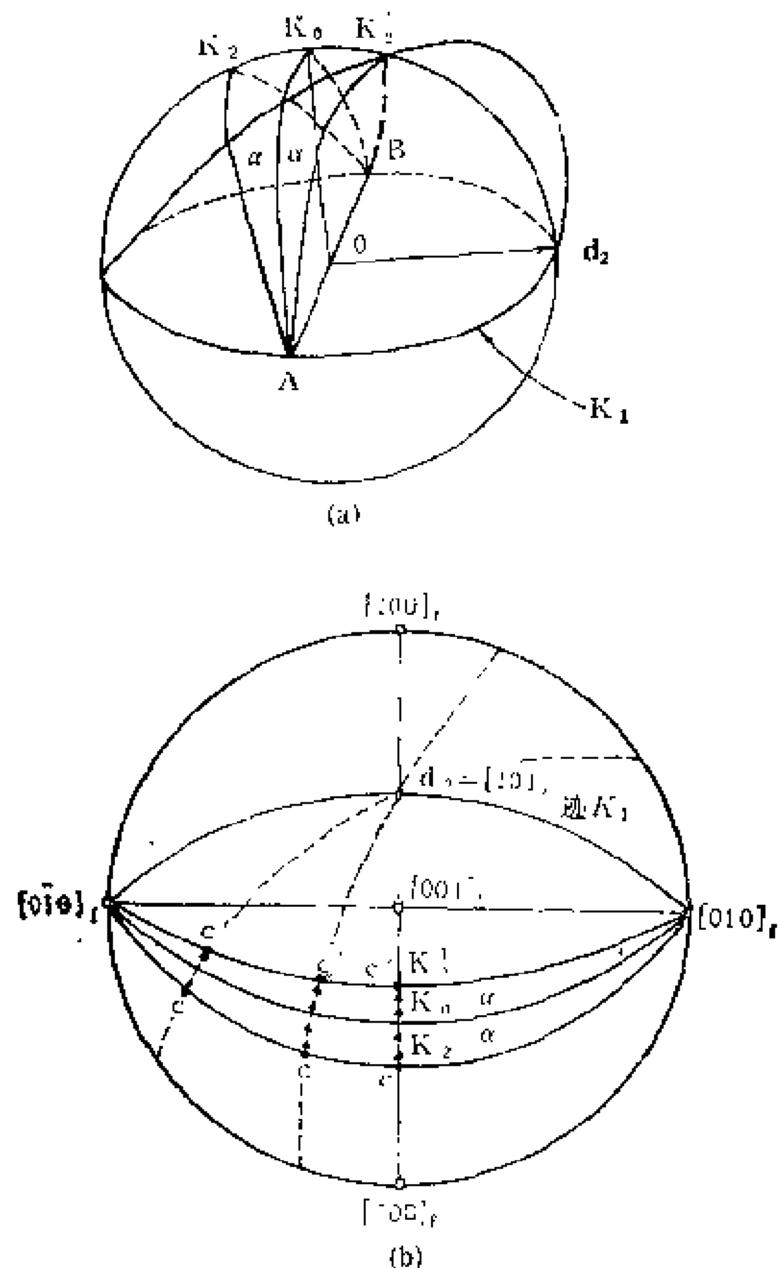


图 I.2 简单切变下的不变面（孪晶面）K_1和长度不变线段构成的面AK_2B[8]

(a) 立体示意图.K_1切变面，d_2切变方向

(b) 极射投影图.切变前后位置C，C′与切变方向d_2在大圆弧上

图 Ⅰ.3 简单切变的横截面图(K_2以左的半径缩短，以右的伸长[4])

单切变，切变面为K_1，切变方向为**d**，切变角α，则如图Ⅰ.3所示，

$$\tan\ \alpha = \frac{|g|}{2} \qquad (Ⅰ.10)$$

可以看出，经过这种简单切变后，切变面及其平行平面既不转动又无畸变（这种面上的矢量既不改变方向，又不改变长度）。而AK_2B面转到$AK_2'B$处，发生转动，但其上的任何矢量的长度不变。此外，其他的矢量，例如由球心出发的矢量，在AK_2B以左者均缩短，而在$AK'B$以右者均伸长，两者均同时旋转。因而，如果把经过Bain畸变和旋转的应变部分再作简单切变，则可能再得到另一个不变线段（不平行于原来得到的AC）。为了在简单切变中不改变AC，必须把AC置于切变面K_1上。或者换句话说，简单切变的切变面，必须选那种包含AC在其上的面。于是，进行适当方向和大小的切变，使在前两次应变中缩短的线段在切变时伸长，或者原来伸长的线段缩短，则可能得到另一根长度不变的线段PP。此时，若以AC为轴旋转，则既不影响AC的方向，又不影响AC的长度，若这种旋转能把PP转回在全部应变以前的位置，则PP就是第二根方向和长度都不变的线段，则AC和PP线所决定的平面，在Bain畸变、简单切变、和数次旋转以后，能保持不转动不畸变，因而这些应变的总和，就是所求的平面不变应变，即控制马氏体转变的平面不变应变。

还须说明两点，一是空间的转动构成旋转群，因而多次旋转

的总和等于一个旋转。第二，前面说过，旋转不改变点阵，但均匀的简单切变要改变点阵类型，破坏Bain畸变的效果，因而简单切变必须是不均匀的，以滑移或孪生的方式，如图Ⅰ.4所示。因而这种简单切变是"不改变点阵"的应变。若简单切变为孪生，则界面AZ是个平均值，由各部孪晶与母相的界面构成，如图Ⅰ.5所示，即

$$AZ = AB + BC + CD$$

整个马氏体转变，可以由图Ⅰ.6示意地表出，图(a)为母相点阵，(b)为Bain畸变后形成的马氏体点阵，(c)为以滑移为简单切变的情况，(d)为以孪生为简单切变的情况，最后再作适当的旋转，使整个应变为一个平面不变应变。再次说明，上述的图

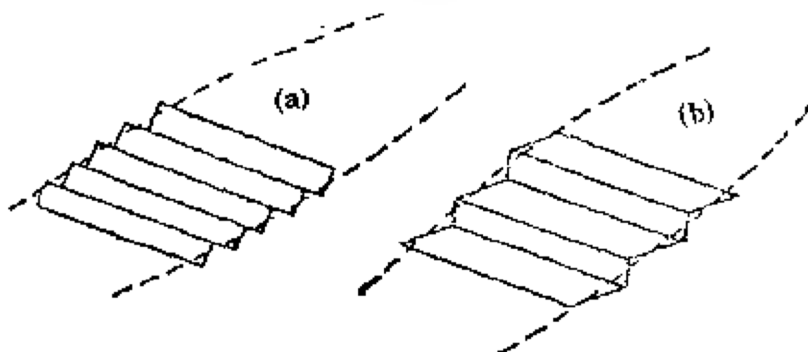


图 Ⅰ.4 含有内部滑移(a)和内部孪晶(b)的马氏体片

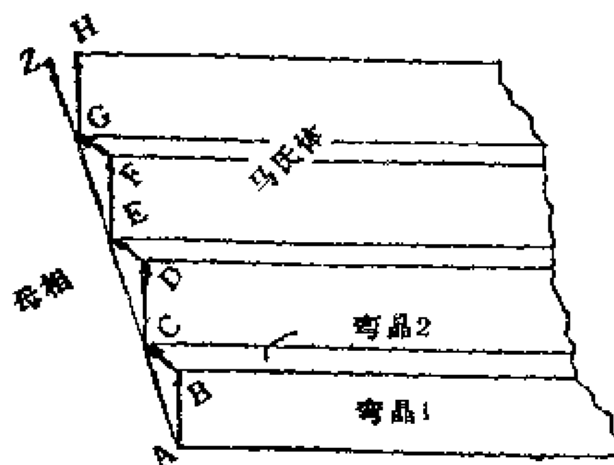


图 Ⅰ.5 各部孪晶与母相的界面构成平均的马氏体边界[8]

解，是对唯象理论的解释，不是马氏体转变的实际过程，不是马氏体转变的机制，而是一系列虚构过程，是一种数学上的分解。

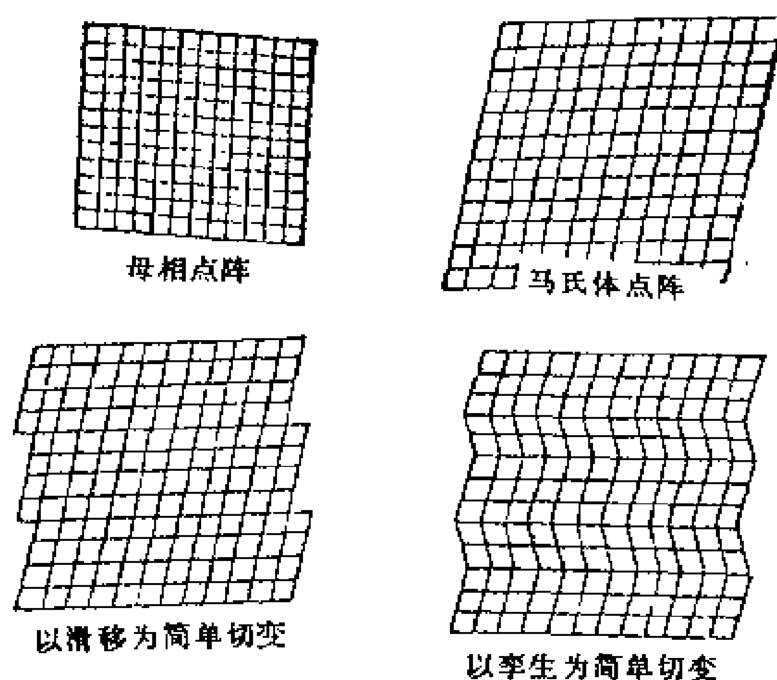


图 I.6 马氏体转变的示意图（按唯象理论虚构）[8]

由于马氏体转变晶体学唯象理论的巨大成功，自然会有人对其基本命题进行探讨，也必然会有人问：为什么马氏体转变通过平面不变应变来完成？为什么平面不变应变在马氏体转变中起如此重要的控制作用？就笔者所知，还缺乏这方面的论述。自然的推想是：这必然与转变过程中的能量学有关，但要证明平面不变应变是各种可能应变中耗能量少的应变是很困难的。首先是建立“各种可能的应变”的完全集合就非易事。正是基于这方面的考虑和分析，才建议了本书第一章的马氏体形核理论，但这已不是唯象理论的内容了。

I.3 求解问题

I.3.1 问题的类型

首先，唯象理论的方程 D＝RBS，如以前所述，是个 3 行 3

列的矩阵方程，相当于9个独立方程的联立方程组，而其中独立的变量有15个；D虽有9个元素，但受方程（I.2）的约束，由p′和d完全决定，而p′为单位矢，因此只有5个独立变量；而R为正交矩阵，受（I.7）式约束，因此只有3个独立变量；B是对角矩阵，有3个独立变量；S由切变面和切变矢量（方向、大小）决定，切变面法矢为单位矢量，有2个独立变量，切变方向为单位矢，且必须在切变面上，只有一个独立变量，切变矢量的大小为一独立变量。以上可归纳为下表

因　　子	独 立 变 量 数
D	5
R	3
B	3
S	4

唯象理论提供9个方程，其中包括15个独立变量，因此，从原则上说，当已知6个独立变量，就可能求出另9个变量。但是，由于这9个方程的联立组并非都是线性方程，而有高次方程，因而求解并非轻而易举的事情。有时会有无解的情况，最通常是有4组解，有时退化为2组。不少人努力于建立电脑计算程序来处理求解的问题，较好的并可用于较一般情况的程序由Ledbetter和Wayman建立[10]。

最典型的、也是用的最多的求解题目是：已知马氏体和母相的点阵类型和点阵常数，设定简单切变面和切变方向，求解此马氏体转变的惯习面、点阵取向关系、总应变量、及简单切变量。马氏体和母相的点阵类型和点阵常数，可由X射线及透射电镜等较准确地测得。简单切变的面和方向，可以参照塑性形变的研究成果进行假设及试探。所求得的惯习面及取向关系可由实验验证，简单切变若为孪晶，则算得的切变量可由观察到的孪晶验证。还可以算出界面的空间取向，也可由电镜观察来检验。这些实验，可以验证唯象理论是否正确，同时也检验所设定的简单切变面和方向是

否正确。在许多情况下，简单切变面和方向并非塑性形变的滑移系统或孪生系统，因而需要反复试探，直至与实验结果符合，因此，这种冗长繁复的计算，最好用电脑进行。

除上述典型问题外，用唯象理论进行的计算类型还有：第二类型，已知马氏体和母相的点阵类型和点阵常数，测定惯习面作为平面不变应的不变面，设定不变面的位移，则可求出简单切变面和方向。第三类型是已知简单切变面及不变面的位移，求不变面法矢及简单切变方向。第四个类型则相反。以上4种类型均要求已知马氏体及母相的点阵类型及点阵常数，目的是求得此马氏体转变的Bain畸变。但这一过程并不可逆，由Bain畸变不能求得两相的点阵类型和点阵常数，因而，唯象理论不能用于求两相的点阵类型和点阵常数。

现在进一步分析最典型的求解问题。由已知的马氏体和母相的点阵常数，设定点阵对应性，即可以求得 Bain 畸变，为一对角矩阵，确定了 3 个独立变量。设定简单切变面$\mathbf{q}'$和方向$\mathbf{e}$为

$$\mathbf{q}'=[q_1,\ q_2,\ q_3] \tag{I.11}$$

$$\mathbf{e}=\begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{bmatrix} \tag{I.12}$$

因为简单切变方向必在简单切变面上，即满足

$$\mathbf{q}'\mathbf{e}=q_1e_1+q_2e_2+q_3e_3=0 \tag{I.13}$$

且$\mathbf{q}'$和$\mathbf{e}$为单位矢（归一化），因而

$$(q_1)^2+(q_2)^2+(q_3)^2=1 \tag{I.14}$$

$$(e_1)^2+(e_2)^2+(e_3)^2=1 \tag{I.15}$$

因而设定的$\mathbf{q}'$和$\mathbf{e}$只确定了 3 个独立变量。加上Bain畸变的 3 个变量，到此为止已知 6 个独立变量，从原则上说，已可能运用唯象理论的 9 个联立方程求得惯习面（即平面应变的不变面）、点阵取向关系、总应变量、简单切变量、以及界面的空间取向了。

I.3.2 典型问题的输入与输出

如上所述，典型问题是已知马氏体和母相的点阵类型和点阵常数，从而求得 Bain 畸变，然后设定简单切变面和方向，通过唯象理论的（I.1）式的 9 个联立方程，求得惯习面、取向关系、应变量等。

现在来说明如何求得 Bain 畸变张量。在研究钢中马氏体转变时，Bain 于 1924 年建议了一个由面心立方奥氏体转变为体心四方马氏体的应变[11]，这种应变被称为Bain畸变。以后的实验证明，Bain 畸变所得到的马氏体的取向关系，与实际测得的完全不符，因而 Bain 畸变决不是表示马氏体转变机理的应变。但 Bain 畸变，从理论上说，的确可以把奥氏体点阵转变为马氏体点阵，后来，就把能使母相转变为马氏体相的应变，统称为（广义的）Bain 畸变，而不仅限于钢中。Bain 畸变虽不是马氏体转变的真实机制，但在唯象理论中起重要的作用。

原始的Bain畸变如图 I.7所示，处理面心立方点阵畸变为体

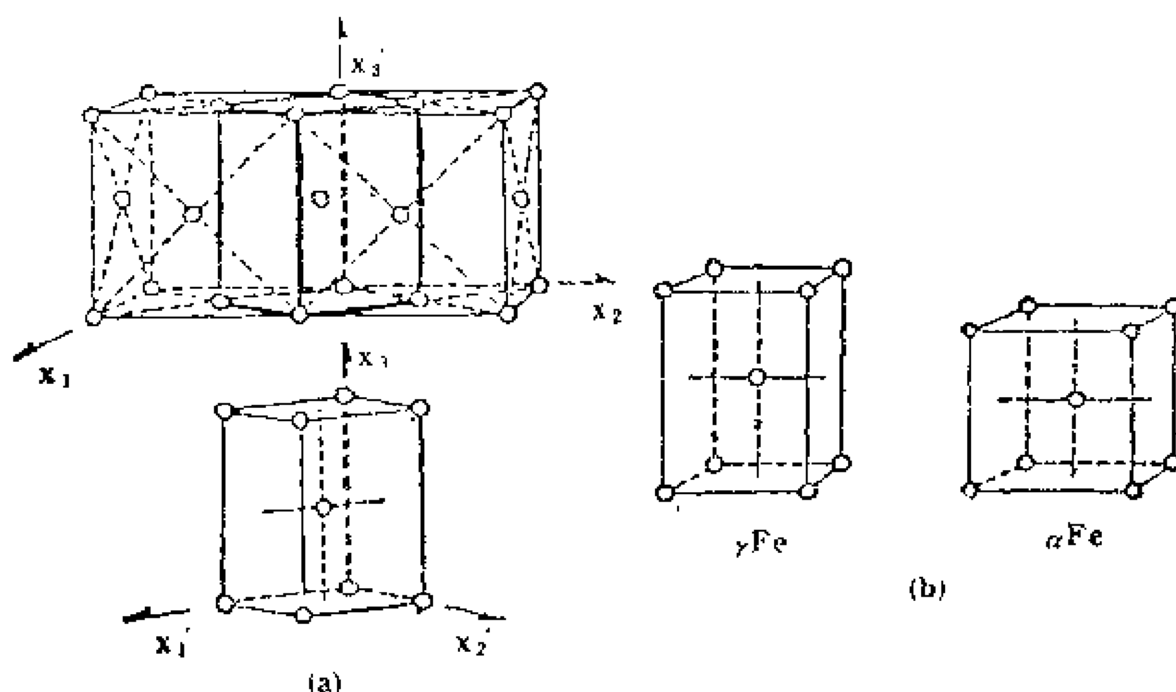


图 I.7 Bain畸变[4]

(a)面心立方点阵中取出体心四方点阵晶胞

(b)x'_1, x'_2拉伸，x'_3压缩得到马氏体点阵常数

心四方点阵的马氏体转变。图（a）中示出，面心立方点阵中可以取出体心四方的晶胞。图（b）示出，如在 $x'_3 = x_3$ 轴方向适当压缩，在 x'_2 及 x'_1 轴适当拉伸，则可得到马氏体的点阵类型和点阵常数。这种Bain畸变的特点，除能得到马氏体结构外，还要尽可能保持原子位移最小，且在适当的坐标系中能表为纯粹的正应变，而无切应变，即表为对角矩阵。但这种Bain畸转变的结果，会得到取向关系为 $(001)_A \parallel (001)_M$；$[100]_A \parallel [100]_M$，其中下标A表奥氏体，M表马氏体。但在铁合金及钢中均未发现这种取向关系，证明马氏体转变不是由Bain畸变得到，还须加以旋转和简单切变，才能得到正确的取向关系和惯习关系。另外，一个应变张量总可分解为一个对称张量和一个反称张量之和，前者即纯粹的应变，后者为转动。而一个表示对称张量的对称矩阵，总是可以对角化，因而Bain畸变通常写成对角矩阵，其坐标系必为主轴系统。

能把母相点阵畸变为马氏体的应变不止一种，其中原子移动最少，即应变量最小的那一种应变，常用于唯象理论中，并被称为（广义的）Bain畸变。这里的"原子移动最小"这一命题不必作严格的数学证明，而是凭物理的考虑或直觉。在迄今研究得较多的马氏体转变系统中，这一点尚未出现问题，即Bain畸变很容易选定，且能得到与实验一致的计算结果。但尚未认真考查的马氏体转变系统还很多，特别是对称性较低的点阵，Bain畸变的选定未必简单明显，此时可能需要反复试探，才能得到适合于唯象理论的、也很可能是真正起作用的Bain畸变。Bain畸变确定后，母相和马氏体相的点阵阵点的对应关系完全确定，因此，也可以把确定Bain畸变叫做确定"点阵对应性"（lattice correspondance），作为晶体学唯象理论计算的第一步。

第二步是设定简单切变面q′和方向e。从唯象理论基本公式（I.1）可以看出，作为一个数学算子，简单切变S是首先起作用的。而矩阵的乘法遵从结合律但不遵从交换律，因而运算次序不能改变。唯象理论并不处理实际的转变过程，但可由虚拟的（或

学的）过程来代替实际过程，得到相同的转变结果。在这虚拟过程中，简单切变首先作用于母相上。因而自然地，母相点阵的滑移面和孪晶面，可以作为首批试探的简单切变面。此外，一些简单指数（低指数）的较密排面，也可以作为试探的简单切变面。这些面中，通过试探计算出正确惯习面及取向关系的简单切变面，可能是正确的简单切变面。对于以孪生为简单切变的转变而言，在马氏体中可观察到孪晶，可测出孪晶面。此孪晶面应按点阵对应性与所设简单切变面对应。换言之，所设简单切变面应通过 Bain 畸变 B 和转动R转变为马氏体的孪晶面。Mackenzie和Bowles [12] 认为在形成马氏体孪晶的一些合金系统中，简单切变面应选用母相点阵的对称面。简单切变方向也可由母相的滑移方向或孪生方向试探，或用低指数方向(须在简单切变面上)试探。如果设定母相的两孪晶部分与马氏体的两孪晶部分分别遵从同一点阵对应性，则简单切变方向将被确定，而不能任意选择，而且通常是无理方向。可以看出，虽可设定简单切变面及方向进行反复试探，但这种设定也要受到一定的限制。

以上是对这类典型问题的已知条件的分析，在电脑计算中，属于输入数据（input data）。下面分析这类问所求解的结果，也即是输出数据（output data）。

首要的目的，是要求得惯习面。在用唯象理论的计算结果中，惯习面就看作是平面不变应变的不变面p′。由此可见，无形中假定了马氏体是以不变面为惯习面的片状组织。反过来说，完成马氏体转变的平面不变应变，是以惯习面为不变面的应变。由此可以看到平面不变应变与晶体学的密切关系。平面不变应变的另一构成要素是不变面的位移矢量d，其大小ε=|d|，非常粗略然而简单明了地表示了马氏体转变的总体应变的大小。d一般不在不变面p′上，两者的夹角，正能显示马氏体转变的切变分量与正应变分量的相对大小。一般而言，马氏体转变是以切应变为主的。因此，求解的第一项任务是求p′和d，从而得到平面不变应变D，同时也求得了惯习面和总体应变，以及切应变与正应变的相

对大小，这里涉及的独立变量数为5，其中$\mathbf{p}'$为单位矢，有2个独立变量，$\mathbf{d}$的方向和大小，含3个独立变量。

第二个目标是求简单切变量的大小ξ。在设定条件中，只有简单切变面和方向，而没有切变量的大小ξ（等于简单切变矢量的模）。对于以孪生形式进行简单切变的系统，ξ的值更为重要，因为直接可与孪晶的量相联系，是可以实验检测的量，对验证唯象理论十分重要。

第三个目标是求得两相点阵的取向关系。这又是一个可以实验检测的结果，同时也是马氏体转变的根本特征之一，因而是十分重要的。在求得平面不变应变$\mathbf{D}$以后，任何母相的晶向$\mathbf{x}_A$或晶面$\mathbf{n}'_A$，分别按以下变换成为马氏体中的晶向$\mathbf{x}_M$和晶面$\mathbf{n}'_M$

$$\left.\begin{aligned} \mathbf{x}_M &= \mathbf{D}\mathbf{x}_A \\ \mathbf{n}'_M &= \mathbf{n}'_A\ \mathbf{D}^{-1} \end{aligned}\right\} \quad (\mathrm{I}.16)$$

其中下标A和M分别表母相及马氏体，$\mathbf{D}^{-1}$是$\mathbf{D}$的逆矩阵。从而确定了两相的取向关系，在同一坐标系（例如主轴系）下比较平行的晶面和晶向，即可得到常见的取向关系表示方法。

计算还可得到旋转矩阵$\mathbf{R}$，从而可以求出马氏体转变中晶体旋转的轴和旋转角度。但这在电镜观察马氏体形貌和作结构分析时，均难于测定。

另一项在细致分析后可以实验检测的微妙结果是界面的空间取向。平均地来说，界面应为平面不变应变面，即平行于惯习面。但因平面不变应变中，含有不均匀分布的简单切变，尤其是当此简单切变取孪生的形式，则各部分孪晶与母相之间的界面[局域界面（local interface)]，不同于平均界面，且可计算出来，与电镜观察结果对比，从而对验证唯象理论有一定意义。正是在这种细致的分析上，可能显示出B-M理论和W-L-R理论与出发点不同的“界面位错”理论之间的差异，如文献[9]中所论述。

Ⅰ.4 解题步骤

现仍以最典型的问题为例，来说明解题的步骤。首先归纳前述的结果：已知Bain畸变B（由母相和马氏体的点阵类型和点阵常数求得）及简单切变面和方向（参考母相滑移系或孪生系设定，或用低指数晶面晶向试探），通过唯象理论（Ⅰ.1）式，求得平面不变应变D，旋转R以及简单切变S，从而得到惯习面、点阵取向关系、总体应变大小、简单切变大小、以及界界的空间位向。所得到的解有三种情况：4组解、2组解和无解。由于解题过程繁杂，因而求解的技巧十分重要，本节将按B-M理论提供的思路[3-5]，说明求解步骤。首先介绍即将应用的有关平面不变应变的知识。

Ⅰ.4.1 平面不变应变

平面不变应变是这样的应变，在物体经该应变后，总有一个平面，其上任意线矢的长度和方向均不变。事实上，由于一个平面上的任意矢量，可由任两个不共线的基矢表示，因而，只需经历一应变后，能找出一个平面，其上任两不共线的线矢的长度和方向不变，则此应变为平面不变应变。可以看出，平面不变应变是由不变面之间的平动构成，此种平移即为不变面的位移d，此平面不变应变由d及不变面的法矢p′完全决定。本书中的空间直线矢量简称线矢，用3行1列的矩阵表示，无限平面由其单位长度的法线矢量表示，该矢量由1行3列的矩阵表示，简称法矢，有时代表该平面，有时指矢量本身，在本书不严加区别。经历一应变U后，线矢x和法矢n′遵从不同的变换规律：

$$\left.\begin{aligned}\bar{\mathbf{x}}&=\mathbf{U}\mathbf{x}\\ \bar{\mathbf{n}}'&=\mathbf{n}'\mathbf{U}^{-1}\end{aligned}\right\}\qquad(\text{Ⅰ}.17)$$

即线矢遵从正变换，而法矢遵从逆变换。若线矢为逆变矢量，则

法矢为协变矢量。同分量的线矢和法矢互为转置关系。n′的“′”号表转置矩阵。有关平面不变应变的细节见附录Ⅰ.6节。

平面不变应变必可表为

$$\mathbf{D}=\mathbf{I}+\mathbf{d}\mathbf{p}' = \begin{bmatrix} 1+d_1p_1 & d_1p_2 & d_1p_3 \\ d_2p_1 & 1+d_2p_2 & d_2p_3 \\ d_3p_1 & d_3p_2 & 1+d_3p_3 \end{bmatrix} \tag{Ⅰ.18}$$

任一位矢x的端点在经应变D后的位移矢量为

$$\mathbf{D}\mathbf{x}-\mathbf{x}=(\mathbf{p}'\mathbf{x})\mathbf{d} \tag{Ⅰ.19}$$

其中（p′x）是两矢量的内积，为一标量，可见此位移是沿d的方向，大小则正比于矢端点至作为基准的不变面的垂直距离。因而，若x为不变面上的矢量，则（p′x）＝0，从而矢端位移为零，这正是平面不变应变的特点。

任一平面不变应变D的逆，也为一个平面不变应变，

$$\mathbf{D}^{-1}=\mathbf{I}-\frac{\mathbf{d}\mathbf{p}'}{\det\mathbf{D}}=\mathbf{I}-\frac{\mathbf{d}\mathbf{p}'}{1+(\mathbf{p}'\mathbf{d})} \tag{Ⅰ.20}$$

其中detD为矩阵D的行列式。$\mathbf{D}^{-1}$也以p′为不变面，但不变面的位移矢量为－d/(detD)，因而

$$\mathbf{D}^{-1}\mathbf{x}-\mathbf{x}=-(\mathbf{p}'\mathbf{x})\frac{\mathbf{d}}{\det\mathbf{D}} \tag{Ⅰ.21}$$

平面不变应变除有无限多不变线矢（均在不变面p′上）外，还有无限多个法矢不变的平面，只需它们包含位移d。换言之，其法矢n′垂直于d的所有平面，在应变D后，既不旋转，也不平动，因

$$\mathbf{n}'\mathbf{D}^{-1}-\mathbf{n}'=-\frac{(\mathbf{n}'\mathbf{d})}{(1+\mathbf{p}'\mathbf{d})}\mathbf{p}' \tag{Ⅰ.22}$$

可见在物体遭受应变D后，其中各平面法矢的变化均沿p′的方向而大小正比于（n′d）。当n′垂直于d时，则此法矢n′的变化为零。

直线不变应变（invariant line strain）是具有一个不变线矢和一个不变法矢的应变。顺序作用的两个平面不变应变$\mathbf{D}_1$和$\mathbf{D}_2$，

若其不变面$p_1' = p_2'$或位移矢量 $\mathbf{d}_1 = \mathbf{d}_2$，则两者作用的结果仍是一个平面不变应变，若不满足上述条件，即$p_1' \neq p_2'$且$\mathbf{d}_1 \neq \mathbf{d}_2$，则两者作用结果构成一个直线不变应变**L**

$$\mathbf{L} = \mathbf{D}_1 \mathbf{D}_2 \qquad (\text{I}.23)$$

直线不变应变的充要条件是有一个不变线矢 **x**，一个不变应变法矢$\mathbf{n}'$

$$\left.\begin{array}{l} \mathbf{L}\mathbf{x} = \mathbf{x} \\ \mathbf{n}' = \mathbf{n}'\mathbf{L}^{-1} = \mathbf{n}'\mathbf{L} \end{array}\right\} \qquad (\text{I}.24)$$

可以看出，直线不变应变由其不变线矢**x**及不变法矢 $\mathbf{n}'$ 完全并唯一地决定。**x**为两平面不变应变的不变面p_1'和p_2'的交线，$\mathbf{n}'$为包含两位移矢量$\mathbf{d}_1$，$\mathbf{d}_2$的平面的法矢[注意：不变法矢不是不变面的法矢，前者表不转动不平动，但可畸变的面，后者表不转动不畸变、但可平动的面。不变法矢又叫"法矢不变的平面"（plane with the invariant normal）]。

I.4.2 B-M理论解题步骤

如前所述，用唯象理论求解具体问题，由于联立方程组中可能含2次以上的方程，因而求解过程可能冗长繁难。B-M理论的解题步骤较为简明，现按文献[8]的叙述介绍于下。唯象理论基本方程**D** = **RBS**，即

$$\mathbf{D}\mathbf{S}^{-1} = \mathbf{R}\mathbf{B} \qquad (\text{I}.25)$$

因**D**与$\mathbf{S}^{-1}$均为平面不变应变，在一般情况下上式为一直线不变应变

$$\mathbf{L} = \mathbf{D}\mathbf{S}^{-1} = \mathbf{R}\mathbf{B} \qquad (\text{I}.26)$$

$$\mathbf{D} = \mathbf{L}\mathbf{S} \qquad (\text{I}.27)$$

求解的思路是：先求出**L**，则可得到**R**，然后利用简单切变的特性再求得**D**。

第一步，求**L**，即求出确定**L**的不变线矢**x**和不变法矢$\mathbf{n}'$。因为**L** = **RB**，因此**L**是Bain畸变后再加旋转构成，旋转矩阵是未知的。但旋转不改变矢量的长度，因而只有那些经应变 **B** 后长度不

变的线矢和法矢，才可能在旋转后成为不变线矢和不变法矢（指长度和方向均不变）。又因$L=DS^{-1}$，即L必须能分解为S^{-1}和D这两个平面不变应变，因此L的不变线矢x必须在简单切变面q'上（也应在D的不变面p'上，但此面是要求的未知数，故这一条件不能利用）。L的不变法矢n'又必须垂直简单切变方向e，（也需垂直于D的位移矢d，但d为需求的未知数），否则不能分解为S^{-1}和D这两个平面不变应变。归纳起来，不变线矢x需满足以下条件

①在应变B作用后长度不变，即

$$(Bx)'(Bx)=x'x \qquad (\text{I}.28)$$

因为任一矢量v的长度的平方为$v'v$，上式即

$$x'B^2x=x'x \qquad (\text{I}.29)$$

②不变线矢x必需在简单切变面q'上，即

$$q'x=0 \qquad (\text{I}.30)$$

③不变线矢x为单位矢量，即

$$x'x=1 \qquad (\text{I}.31)$$

④经B及旋转R后，成为不变线矢，即

$$RBx=x \qquad (\text{I}.32)$$

按照这4个条件，可以求出x，同时求出R。对于不变法矢n'，应遵守相似的4个条件，即

① $$n'(B^{-2})n=n'n \qquad (\text{I}.33)$$

② $$n'e=0 \text{（e为简单切变的方向）} \qquad (\text{I}.34)$$

③ $$n'n=1 \qquad (\text{I}.35)$$

④ $$n'(RB)^{-1}=n' \qquad (\text{I}.36)$$

由此可以求出n'。在求得x和n'的同时，此直线不变应变$L=RB$自然求得。

第二步是由L通过简单切变的特性求D。因为S是一简单切变，是平面不变应变的特例，按附录Ⅰ.6节有

$$p' /\!/ q'(L^{-1}-I) \qquad (\text{I}.37)$$

从而求得p'，经归一化即得所求D的不变面法矢。到此为止，得到了最感兴趣、且最易由实验验证的惯习面、即不变面p'。

第三步求总体应变量$\varepsilon=|\mathbf{d}|$，从而最终得到D。由附录Ⅰ.6节

$$\mathbf{d}=\frac{\mathbf{Le}-\mathbf{e}}{(\mathbf{p}'\mathbf{e})} \quad (\text{Ⅰ}.38)$$

由此求得D的位移矢量$\mathbf{d}$。从而彻底解决求D的问题。$\mathbf{d}$一般不是单位矢量，可归一化为$\mathbf{d}_\circ$，归一化因子为ε，则

$$\mathbf{d}=\varepsilon\mathbf{d}_\circ \quad (\text{Ⅰ}.39)$$

ε表示了马氏体转变的总体形变的大小，是一个很重要的参数。

第四步是求出简单切变量的大小。在到此为止的叙述中，$\mathbf{e}$是作为单位矢量使用的。换言之，$\mathbf{e}$只是表示了简单切变的方向，并未表示简单切变量的实际大小。现在引入$\mathbf{e}_\circ$表示实际的简单切变矢量，由附录Ⅱ.6得

$$\mathbf{e}_\circ=\frac{\mathbf{z}-\mathbf{L}^{-1}\mathbf{z}}{\mathbf{q}'\mathbf{L}^{-1}\mathbf{z}} \quad (\text{Ⅰ}.40)$$

其中$\mathbf{z}$为$\mathbf{q}'$面上不同于不变矢$\mathbf{x}$的任意矢量，归一化因子为ζ，则

$$\mathbf{e}=\frac{1}{\zeta}\mathbf{e}_\circ \quad (\text{Ⅰ}.41)$$

ζ为简单切变的大小，当简单切变以孪生形式实现时，ζ直接与孪晶的量相联系，是可以实验检测的量，有重要意义。简单切变矩阵为

$$\mathbf{S}=\mathbf{I}+\mathbf{e}_\circ\mathbf{q}' \quad (\text{Ⅰ}.42)$$

到此为止，已经求出了马氏体转变的平面不变应变D，旋转R，及简单切变S。从而得到了最感兴趣的惯习面$\mathbf{p}'$，位移$\mathbf{d}$，总体形变量ε，及简单切变量ζ。另一个感兴趣的是点阵的取向关系，很容易求出。至此唯象理论要求求解的问题，已完全解决。

Ⅰ.5 计算方法

Ⅰ.5.1 计算步骤

计算中用到的主要是矩阵运算和张量代数，涉及到二阶张量

（表为3行3列矩阵）及矢量（表为行矩阵和列矩阵）。特别要注意的是张量及矢量在不同坐标系中的表象，以及不同表象下的变换。至少要用到3种坐标系：按母相点阵晶胞所建立的基矢坐标系统，按马氏体点阵晶胞建立的基矢坐标系统，以及将Bain畸变表为对角矩阵的主轴坐标系统。在运算中，为了计算的方便，还会用到其他坐标系统。有关张量和矩阵的基础知识，将在附录Ⅱ中叙述。为了简明起见，将以由面心立方的母相至体心立方的马氏体转变为例。

1．建立已知条件

①由母相（f.c.c）的点阵常数a_o及马氏体（b.c.c.）的点阵常数a得到Bain畸变

$$(f\mathbf{B}f)=\begin{pmatrix}\eta_1 & 0 & 0\\ 0 & \eta_2 & 0\\ 0 & 0 & \eta_3\end{pmatrix} \qquad (\text{I}.43)$$

其中（$f\mathbf{B}f$）表示在母相f.c.c.中发生应变B并表象于母相的基矢坐标系统中。在本例中，此坐标系即为一主轴系。式中

$$\eta_1=\eta_2=\frac{\sqrt{2}\,a}{a_o} \qquad (\text{I}.44)$$

$$\eta_3=\frac{c}{a_o}=\frac{a}{a_o} \qquad (\text{I}.45)$$

②简单切变面和方向分别定为马氏体的{112}和〈111〉，也即母相的{110}和〈110〉。在以下的计算中将用特定的$(101)_f$及$[\bar{1}01]_f$。

2．计算求解的步骤

①求经($f\mathbf{B}f$)后长度不变的线矢 $\mathbf{x}=\begin{pmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{pmatrix}$。由（Ⅰ.29）－（Ⅰ.31）

$$\left.\begin{aligned}&(\eta_1^2-1)x_1^2+(\eta_2^2-1)x_2^2+(\eta_3^2-1)x_3^2=0\\&q_1x_1+q_2x_2+q_3x_3=0\\&x_1^2+x_2^2+x_3^2=1\end{aligned}\right\} \qquad (\text{I}.46)$$

所求得的x一般有2组解，特殊情况下为1组2重解，也可能无解。

②求不变线矢x的转动。上面求得的x只是在经受 $(f\mathbf{B}f)$ 后长度不变，但要发生转动，如前面图Ⅰ.1所示。如果加一个转动把x转回它在应变前的位置，则成为在 $(f\mathbf{B}f)$ 应变及此转动下的不变线矢x，现在的问题就是要求出这个转动。x经 $(f\mathbf{B}f)$ 后有下列变化

$$(f\mathbf{B}f)\mathbf{x}=\bar{\mathbf{x}} \tag{Ⅰ.47}$$

$$\mathbf{q}'(f\mathbf{B}f)^{-1}=\bar{\mathbf{q}}' \tag{Ⅰ.48}$$

其中 $\bar{\mathbf{x}}$ 和 $\bar{\mathbf{q}}'$ 是长度不变的线矢x和简单切变面法矢q′经应变 $(f\mathbf{B}f)$ 后的矢量，以上矢量均表象于母相基矢系统。现在建立两个参考坐标系统 $\mathbf{R}_1$ 和 $\mathbf{R}_2$。$\mathbf{R}_1$ 坐标系的三轴为x，q，u，其中

$$\mathbf{u}=\mathbf{x}\times\mathbf{q} \tag{Ⅰ.49}$$

x是在简单切变面q′上求得，故x与q′自然相互垂直。$\mathbf{R}_2$ 坐标系统的三轴为 $\bar{\mathbf{x}}$，$\bar{\mathbf{q}}$，v，其中

$$\mathbf{v}=\bar{\mathbf{x}}\times\bar{\mathbf{q}} \tag{Ⅰ.50}$$

建立两个表旋转的正交矩阵 $\mathbf{R}_1$ 和 $\mathbf{R}_2$ 如下

$$\mathbf{R}_1=\begin{bmatrix} x_1 & q_1 & u_1 \\ x_2 & q_2 & u_2 \\ x_3 & q_3 & u_3 \end{bmatrix} \tag{Ⅰ.51}$$

$$\mathbf{R}_2=\begin{bmatrix} x_1 & q_1 & v_1 \\ x_2 & q_2 & v_2 \\ x_3 & q_3 & v_3 \end{bmatrix} \tag{Ⅰ.52}$$

可以得到一个直线不变应变 $\mathbf{L}_o$，表象在母相坐标系中为

$$(f\mathbf{L}_of)=\mathbf{R}_1\mathbf{R}_2'\ (f\mathbf{B}f) \tag{Ⅰ.53}$$

以线矢x作为其不变线矢。为了证明这一点，可分两步来旋转。先由（Ⅰ.47）求得一个经B后长度不变、但方向变化的矢量 $\bar{\mathbf{x}}$，而

$$\mathbf{R}_2'\ (f\mathbf{B}f)\mathbf{x}=\mathbf{R}_2'\ \bar{\mathbf{x}} \tag{Ⅰ.54}$$

表示把$\bar{x}$矢量（R_2坐标系的第一轴）旋转至母相基矢系中的第一坐标轴（即f.c.c坐标的x_1轴。注意：任何旋转R'即为R^{-1}），而

$$R_1R_2'(fBf)x = R_1R_2'\bar{x} = x \qquad (Ⅰ.55)$$

表把现处在f.c.c的x_1轴上的矢量$R_2'\bar{x}$转至R_1坐标系（x，q，u）的第一轴（即x）上。因此，经历B和旋转（R_1R_2'）后，x是一个长度不变，方向也不变的矢量，即L_0的不变线矢，证毕。因x已在简单切变面上，故也是S的不变线矢。在以后的旋转中只以x为轴，直到得到平面不变应变，因而x也是D的不变线矢之一。

③求长度不变的法矢$n'=(n_1, n_2, n_3)$。由(Ⅰ.33)－(Ⅰ.35)

$$\left.\begin{aligned}&\left(\frac{1}{\eta_1^2}-1\right)n_1^2+\left(\frac{1}{\eta_2^2}-1\right)n_2^2+\left(\frac{1}{\eta_3^2}-1\right)n_3^2=0\\&n_1e_1+n_2e_2+n_3e_3=0\\&n_1^2+n_2^2+n_3^2=1\end{aligned}\right\} \qquad (Ⅰ.56)$$

可解得n'，可能有两组解，也可能无解。

④求不变法矢n'的转动。上面求得的n'在经（fBf）后长度不变，再经旋转(R_1R_2')后长度仍不变，但这三次操作均改变n'的方向，即

$$n'(fL_0f)^{-1}=\bar{n}' \qquad (Ⅰ.57)$$

一般而言，n'与$\bar{n}'$的方向不同。若以已经求得的不变线矢x为转轴旋转，则可能使n'和$\bar{n}'$重合。换言之，可能找到一个旋转R_3，从而得到另一个直线不变应变L，

$$n'(fR_3L_0f)^{-1}=\bar{n}'R_3'=n' \qquad (Ⅰ.58)$$

$$(fLf)=(fR_3L_0f) \qquad (Ⅰ.59)$$

满足

$$(fLf)x=x \qquad (Ⅰ.60)$$

$$n'(fLf)^{-1}=n' \qquad (Ⅰ.61)$$

此时n'为L的不变法矢。现在的问题是如何求得R_3。为了解决这一问题，先把有关的矩阵变换到R_1坐标系（x，q，u）中表象，则以x为轴的旋转具有形式

$$(R_1R_3R_1)=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & \cos\beta & -\sin\beta\\ 0 & \sin\beta & \cos\beta\end{pmatrix} \tag{I.62}$$

其中（$R_1R_3R_1$）表旋转R_3在R_1坐标系中的表象，β为以x为轴旋转的角度。由关系

$$n'(R_1R_3L_oR_1')^{-1}=n' \tag{I.63}$$

可以定出β，因其余参数均已知道。从而得到了不变法矢n'及所求不变应变$L=DS=RB$，其中

$$R=R_3R_1R_2' \tag{I.64}$$

在确认旋转R_3可把n'重合于$\bar{n}'$时，运用了一个隐含的假定，即x与n'之间的夹角等于$\bar{x}$与$\bar{n}'$之间的夹角。这是很易证明的

$$\bar{x}=Bx \tag{I.65}$$

$$\bar{n}'=n'B^{-1} \tag{I.66}$$

于是

$$\bar{n}'\bar{x}=n'B^{-1}Bx=n'x \tag{I.67}$$

证毕。

⑤求平面不变应变的不变面，也即马氏体转变的惯习面p'，由（I.37）得

$$p' /\!/ [(fLf)^{-1}-I]q' \tag{I.68}$$

经归一化即可。

⑥求平面不变应变D的位移矢量d，由（I.38）得

$$d=\frac{[(fLf)-I]e}{(p'e)} \tag{I.69}$$

（注意分母为一内积所得标量），从而得总体形变量

$$\varepsilon=|d| \tag{I.70}$$

于是由（I.18）完全求得平面不变应变D。

⑦求简单切变量$\zeta=|e_o|$。简单切变矢量e_o由（I.40）得

$$e_o=\frac{[(I-(fLf)^{-1}]z}{q'(fLf)^{-1}z} \tag{I.71}$$

（注意分母为一内积所得标量），因而由（I.41）得到简单切变

量

$$\zeta=|e_o| \tag{I.72}$$

$$\tan a=\frac{\zeta}{2} \tag{I.73}$$

其中a为简单切变的切变角。

⑧求两相点阵的取向关系。由母相的密排面和密排方向，经直线不变应变后（简单切变不改变点阵的空间取向）变成马氏体的晶面和晶向，由点阵对应性得知这些晶面和晶向在马氏体的面指数和方向指数，从而完全确定两相点阵的取向关系。

I.5.2 计算实例

这一实例取自文献[8]，经笔者用自编电脑程序验证无误。Fe-31%Ni合金由f.c.c至b.c.c的马氏体转变，点阵常数(室温)

$$\left.\begin{array}{ll}\text{奥氏体} & a_0=0.3591\text{nm}\\ \text{马氏体} & a=0.2875\text{nm}\end{array}\right\} \tag{I.74}$$

主应变为

$$\left.\begin{array}{l}\eta_1=\eta_2=1.132136\\ \eta_3=0.800541\end{array}\right\} \tag{I.75}$$

则Bain畸变为

$$(f\mathbf{B}f)=\begin{pmatrix}1.132136 & 0 & 0\\ 0 & 1.132136 & 0\\ 0 & 0 & 0.800541\end{pmatrix} \tag{I.76}$$

则

$$(f\mathbf{B}f)^2=\begin{pmatrix}1.281732 & 0 & 0\\ 0 & 1.281732 & 0\\ 0 & 0 & 0.640866\end{pmatrix} \tag{I.77}$$

$$(f\mathbf{B}f)^{-1}=\begin{pmatrix}0.883236 & 0 & 0\\ 0 & 0.883236 & 0\\ 0 & 0 & 1.249155\end{pmatrix} \tag{I.78}$$

$$(f\mathbf{B}f)^{-2}=\begin{bmatrix}0.780194 & 0 & 0\\ 0 & 0.780194 & 0\\ 0 & 0 & 1.560388\end{bmatrix} \tag{I.79}$$

以母相的（101）及［$\bar{1}$01］分别作为简单切面和方向，即

$$\mathbf{q}'=[101] \tag{I.80}$$

$$\mathbf{e}=\begin{bmatrix}-0.707107\\ 0\\ 0.707107\end{bmatrix} \tag{I.81}$$

以上是已知条件，以下求解，

1. 求长度不变的线矢x. 由（I.46）得两解

$$\mathbf{x}_{o1}=\begin{bmatrix}-0.663032\\ -0.347528\\ 0.663032\end{bmatrix};\quad \mathbf{x}_{o2}=\begin{bmatrix}-0.663032\\ 0.347528\\ 0.663032\end{bmatrix} \tag{I.82}$$

均为在母相基矢坐标系统中表象。

2. 求不变线矢x的转动。首先建立坐标系$\mathbf{R}_1$和$\mathbf{R}_2$。$\mathbf{R}_1$的3个基矢为$\mathbf{x}_{o1}$（自然也可选$\mathbf{x}_{o2}$），q和u，其中u为

$$\mathbf{u}=\mathbf{x}_{o1}\times\mathbf{q}=\begin{bmatrix}-0.245739\\ 0.937669\\ 0.245739\end{bmatrix} \tag{I.83}$$

因而$\mathbf{R}_1$为

$$\mathbf{R}_1=\begin{bmatrix}-0.663032 & 0.707107 & -0.245739\\ -0.347528 & 0 & 0.937669\\ 0.663032 & 0.707107 & 0.245739\end{bmatrix} \tag{I.84}$$

现在决定$\mathbf{R}_2$坐标系（$\bar{\mathbf{x}}$，$\bar{\mathbf{q}}$，$\mathbf{v}$）

$$\bar{\mathbf{x}}=(f\mathbf{B}f)\,\mathbf{x}_{o1}=\begin{bmatrix}-0.750642\\ -0.393449\\ 0.530784\end{bmatrix} \tag{I.85}$$

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{q}}'&=\mathbf{q}'(f\mathbf{B}f)^{-1}\\ &=[0.624578\quad 0\quad 0.883286]\end{aligned} \tag{I.86}$$

经归一化后

$$\bar{q}' = [0.577351 \quad 0 \quad 0.816496] \qquad (\text{I}.87)$$

$$v = \bar{x} \times \bar{q} = \begin{bmatrix} -0.321250 \\ 0.919345 \\ 0.227158 \end{bmatrix} \qquad (\text{I}.88)$$

于是

$$R_2' = \begin{bmatrix} 0.750642 & 0.393499 & 0.530784 \\ 0.577351 & 0 & 0.816496 \\ -0.321250 & 0.919345 & 0.227158 \end{bmatrix} \qquad (\text{I}.89)$$

得到

$$(fR_1R_2'Bf)x_{o1} = (fL_of)x_{o1} = x_{o1} \qquad (\text{I}.90)$$

因而得到直线不变应变L_o，

$$(fL_of) = (fR_1R_2'\ Bf) \qquad (\text{I}.91)$$

及其不变线矢x_{o1}。

3. 求长度不变的法矢n'。由（I.56）得到两组解

$$n_1' = (0.530784 \quad 0.660708 \quad 0.530784) \qquad (\text{I}.92)$$

$$n_2' = (0.530784 \quad -0.660708 \quad 0.530784) \qquad (\text{I}.93)$$

以下计算用第一组解。

4. 求不变法矢n'的转动。为了求R_3以确定把法矢$\bar{n}'$转回出发位置n'的转动，先把L_o表象于R_1坐标系中，即进行相似变换

$$(R_1L_oR_1) = R_1' \ (fR_1R_2'Bf)R_1 =$$

$$= R_2'BR_1 = \begin{bmatrix} 1 & -0.300460 & -0.101419 \\ 0 & 0.924386 & 0 \\ 0 & -0.12887 & 1.110011 \end{bmatrix} \qquad (\text{I}.94)$$

其中因R_1为正交矩阵，故$R_1R_1' = R_1R_1^{-1} = I$。$R_3$在$R_1$坐标系中的形式为

$$R_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\beta & -\sin\beta \\ 0 & \sin\beta & \cos\beta \end{bmatrix} \qquad (\text{I}.95)$$

由

$$n_1'[R_3(R_1L_oR_1)]^{-1}=n_1' \qquad (\text{I}.96)$$

得

$$\left.\begin{aligned}0.614220\ \cos\beta+0.669203\ \sin\beta=0.681652\\0.687680\ \cos\beta-0.833221\ \sin\beta=0.595558\end{aligned}\right\} \qquad (\text{I}.97)$$

得

$$\left.\begin{aligned}\cos\beta=0.994375\\\sin\beta=0.105924\end{aligned}\right\} \qquad (\text{I}.98)$$

从而得到R_3，表象于R_1坐标系中。再次用相似变换把$L=R_3L_o$转到母相基矢系统中，即 $(fLf)=(R_1LR_1')$ 得到所求的直线不变应变为

$$(f\mathbf{L}f)=\begin{pmatrix}1.122157 & -0.036954 & -0.102787\\0.021153 & 1.125262 & 0.086809\\-0.148488 & -0.118969 & 0.789154\end{pmatrix} \qquad (\text{I}.99)$$

及

$$(f\mathbf{L}f)^{-1}=\begin{pmatrix}0.875500 & 0.016504 & -1.115850\\-0.028831 & 0.877922 & -0.092819\\-0.160389 & 0.135456 & 1.231388\end{pmatrix} \qquad (\text{I}.100)$$

于是得L为所求的直线不变应变，x_{o1}和n_1'分别为其不变线矢和不变面法矢。

5. 求惯习面，由（I.68），它平行于

$$q'(f\mathbf{L}f)^{-1}-q'=(0.025377,\ 0.107452,\ 0.081697) \qquad (\text{I}.101)$$

经归一化后为D的不变面单位法矢p'

$$p'=(0.184765\quad 0.782337\quad 0.594820) \qquad (\text{I}.102)$$

6. 求D的位移矢量d及总体形变量ε。由（I.69)及（I.70)得

$$\mathbf{d}=\begin{pmatrix} -0.047235 \\ 0.160116 \\ -0.152072 \end{pmatrix} \qquad (\text{I}.103)$$

$$\varepsilon=|\mathbf{d}|=0.225820 \qquad (\text{I}.104)$$

7. 求简单切变矢量$\mathbf{e}_0$及简单切变量ζ，由(Ⅰ.71)和(Ⅰ.72)，取

$$\mathbf{z}=[100]\times\mathbf{p}'=[0.594820,\ 0,\ -0.184765] \qquad (\text{I}.105)$$

得

$$\mathbf{e}_0=\begin{pmatrix} 0.181581 \\ 0 \\ -0.181581 \end{pmatrix} \qquad (\text{I}.106)$$

而简单切变量

$$\zeta=|\mathbf{e}_0|=0.256794 \qquad (\text{I}.107)$$

简单切变角

$$a=\tan^{-1}\frac{0.256794}{2}=7.30^\circ \qquad (\text{I}.108)$$

8. 求两相点阵的取向关系。熟知的Kurdjumov-Sachs关系是

$$(011)_b /\!/ (111)_f$$
$$[1\bar{1}1]_b /\!/ [\bar{1}01]_f$$

现在考察经应变D后，此关系是否符合。因为D所含的因子S（简单切变）是不改变点阵位向的，故只需考查母相中(111)及$[\bar{1}01]$经L后的改变即可

$$\frac{1}{\sqrt{3}}\ (111)_f(f\mathbf{L}f)^{-1}=(0.581425,\ 0.594602, 0.590467)$$

$$(\text{I}.109)$$

乘归一化因子(1/1.019930)后为

$$(0.570063,\ 0.582983,\ 0.578923)$$

为平行于$(011)_b$的面，则内积

$$\frac{1}{\sqrt{3}}\ (111)\begin{pmatrix}0.570063\\0.582983\\0.578923\end{pmatrix}=0.999956 \qquad (\mathrm{I}.110)$$

表明 $(111)_f$ 和 $(011)_b$ 之间夹角为 0.53571°，两者基本平行，符合Kurdjumov-Sachs关系。同理可求晶向的关系

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\ (fLf)\begin{pmatrix}-1\\0\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-0.720803\\0.046426\\0.663613\end{pmatrix} \qquad (\mathrm{I}.111)$$

乘归一化因子 (1/0.980458) 后为

$$\begin{pmatrix}-0.735170\\0.047351\\0.676228\end{pmatrix}$$

此方向为马氏体的$[1\bar{1}1]_b$方向，内积

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\ (\bar{1}01)\begin{pmatrix}-0.735170\\0.047351\\0.676228\end{pmatrix}=0.998008 \qquad (\mathrm{I}.112)$$

求出两者的夹角3.617°，与Kurdjumov-Sachs关系有较大的偏离。

Ⅰ.6　W-L-R理论及B-M理论

Wechsler，Lieberman和Read最先发表他们的理论于*Trans. AIME*(1953年11月)[1]．以后的论文着重于用作图法求解及寻找适用于各种点阵的普遍形式解答．这一理论的主要论点是：Bain畸变是一种原子移动最少的、由母相点阵变为马氏体点阵的方式，并在微小范围内起作用；把这些小范围再加以旋转，构成均匀应变区，然后分条带形成孪晶，如图Ⅰ.8所示．在此情况下每个孪晶片的条带内，是由上述Bain畸变，旋转、和孪晶切变构成一个均匀应变区．相邻的另一孪晶片条带为另一均匀应变区．因而，总的来看，应变是不均匀的（分条带各自均匀），但平均起

来，构成一个保持母相的一个平均面在转变后不转动不畸变的应变，即平面不变应变，可表为D＝RBS其中S为规则间隔分布的

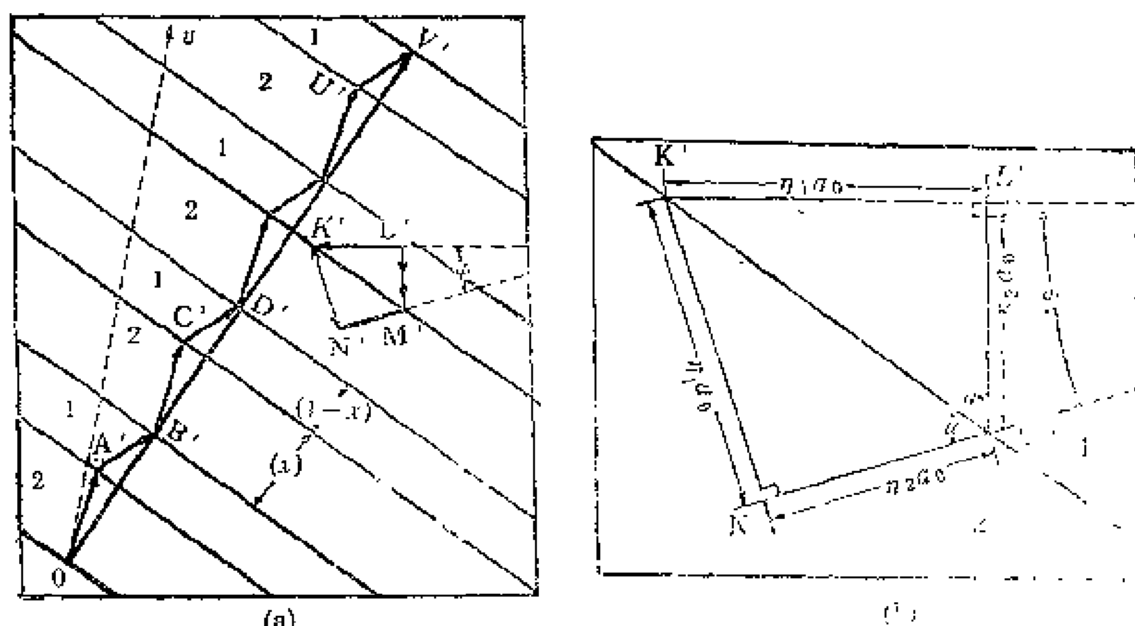
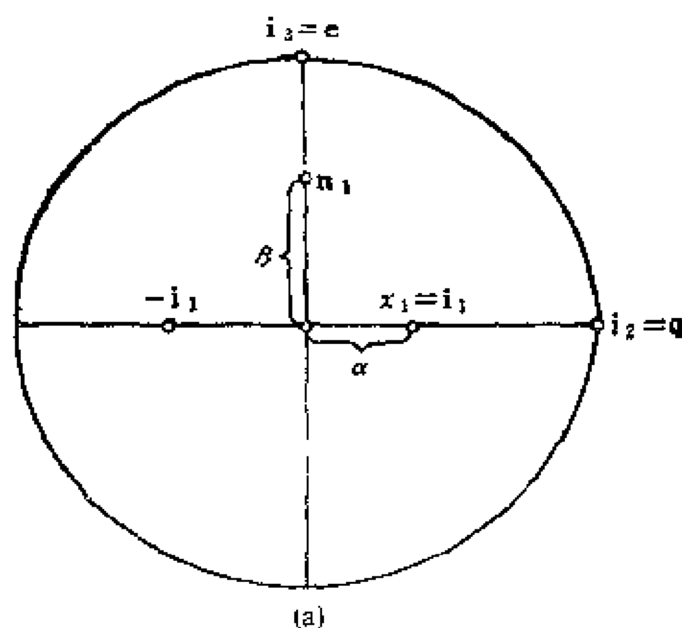


图 I.8 W-L-R理论中的马氏体片孪晶区[1]

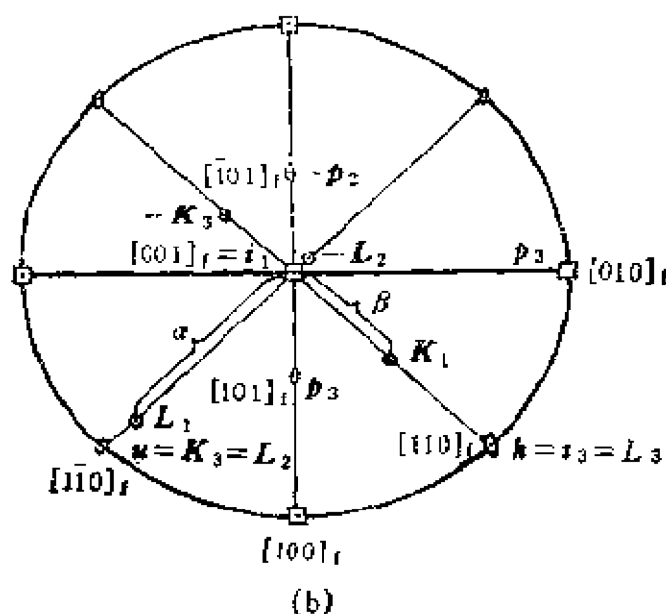
(a) 孪晶1和2各占（1-x）%和x%，折线OA'B'C'…U'V'由直线OV经孪晶切变形成，各孪晶中示出Bain应变
(b) 各孪晶中在转变后的Bain畸变点结

孪晶切变．另一种情况是以滑移代替孪晶，得到单一位向的马氏体片，假定滑移带的分布比上述孪晶分布更为分散，则总的应变较为均匀，但各滑移带之间区域、与包含滑移带及近邻的区域相比，两者的应变不同，故应变仍是不均匀的。只有平均地来看，才是一个平面不变应变．若已知母相和马氏体的点阵类型和常数，以及孪生或滑移系统，则可求出不变面（惯习面，界面）、取向关系及宏观畸变（指平均得到的平面不变应变)．其求解的数学形式与前述的不同，但结果一样。同时发展了图解方法，误差较大。

1954年1月 Bowles 和 Mackenzie 首次于 *Acta Metallurgica*[3-5] 发表他们的理论．他们所介绍的理论形式，可归纳为在马



(a)



(b)

图 Ⅰ.9 B-M理论中马氏体转变的位向关系

(a) 孪晶面q′和方向e以及不变线矢x_1和不变法矢n_1' [4]

(b) 面心立方点阵中的位向 [5]

氏体转变中起作用的直线不变应变为

$$L = DS = R(\delta B) \tag{Ⅰ.113}$$

其中简单切变是孪生.此外，允许有一个近于1的等轴膨胀(压缩)系数δ来调节应变以得到所需的平面不变应变。所使用的δ值，偏离1多在2%以下。这一系数使B-M理论有较大的灵活性、来适应

实验的结果。该理论着重于直线不变应变L，规定其不变线矢在孪晶面上，而不变法矢垂直孪生方向。前面介绍的计算方法，主要依据B-M理论在δ为1时的思路。一般而言，不变线矢和不变法矢可能各有两组解，因而组合为4组计算结果。在B-M理论的文献中，常用 (α+,ω+)，(α+,ω-)，(α-,ω+)和(α-,ω-)来表示这4组解，其中α表不变线矢与i间夹角，$i_1=i_2\times i_3$，其中i_2为孪生方向e，i_3为孪晶面法矢q′，如图Ⅰ.9所示。而ω表示因直线不变应变L＝RB使孪晶面所转动的角度。决定α和ω的方程为二次方程，故一般各有两解。当δ为1时，W-L-R和B-M这两理论实质上等价。

Ⅰ.7　B-B-S界面位错理论

Ⅰ.7.1　界面位错与马氏体转变晶体学

Bilby，Bullough和Smith[6]先提出"连续分布位错"概念，然后Bullough和Bilby[7]用界面位错模型处理马氏体转变的晶体学。这一理论在一些主要方面，可得到与W-L-R和B-M理论相同的结果，如所求得的惯习面、点阵取向关系，但也可能在有些方面有不同的结果，如各孪晶片与母相之间的界面的空间位向等。更为重要的是，这一理论的出发点和思路有独特之处，其转变应变中的简单切变，是由界面上的位错滑动引起，是个客观的物理过程，而不仅是个数学手段。这一节的介绍，若按他们原来的思路，一开始就会碰到一些艰深的概念，如non-Riemann空间、挠率张量等。为了易于明了，由一些简单的特例，介绍这一理论的主要内容，然后再叙述他们原来的推导，供有兴趣的读者研究。

界面位错理论的思路是：一块母相晶体P与一块马氏体晶体M相邻接，若以母相格矢为基矢构成参考坐标系，则马氏体应为一个经过应变E的点阵；P和M的界面，为了适应其两侧的不同相，必含有位错（界面位错），其Burgers矢量及位错密度等，

取决于P和M的点阵差异，即E应变前后的差异；在一些简单的情况下，很易证明当界面推移时（马氏体转变进行），界面位错引起一个简单切变S；若把E表为正应变B和转动R，则界面推移引起的总应变为 $ES = RBS$，可以证明这是一个平面不变应变。从而得到了与另两种理论相同的结果。值得注意的是：转变的平面不变应变是这一理论模型的结果，而不是前提，与前述两理论不同。

先解释界面位错的概念。晶体P与M通过界面层F相联结。由于P与M点阵不同，F的一边同于P点阵，另一边同于M点阵，则F层内必有应变。若F层减薄，则F中应变加大，当F层减薄至几个原子层，可看作是一个界面，其中应变近于不连续，则可以看作位错排列。此位错的Burgers矢量为

$$\mathbf{b} = (\mathbf{E}^{-1} - \mathbf{I})\mathbf{p} \qquad (Ⅰ.114)$$

其中I为单位矩阵，E为将母相变为马氏体的、改变点阵的应变矩阵，p为界面上的任一矢量。这个式子的物理意义可以从界面的角度理解：F层的左侧的矢量p，同于母相中的矢量Ip，（以p的格矢为参考坐标系），经过F层的位错b（急剧的应变），成为F层右侧的矢量Ep，也即M中的同一矢量。

上面（Ⅰ.114）式由连续位错理论导出[13]，但也可按下法的直观方法得到[14]。如图Ⅰ.10所示，有一参考点阵其原点为O，两不同位向的晶体（分别称为正、负晶体）由此参考点阵分别经任意旋转R_+和R_-形成。此两晶体相遇于界面OP，其法矢为$\mathbf{v}'$。现在证明这种组态可以因在界面引入位错而得到。设$OP = \mathbf{p}$是界面上的一个大矢量，考虑一个右手Burgers回路PA_+OA_-P，其中A_+是正晶体中任一点，A_-为负晶体中任一点，如图（a）所示。在参考点阵（完整晶体）中的相应回路为$Q_+B_+OB_-Q_-$。参考点阵回路可由PA_+O和OA_-P部分分别经$\mathbf{R}_+^{-1}$和$\mathbf{R}_-^{-1}$这两个逆旋转得到，如图（b）所示。参考回路不闭合部分为$Q_-Q_+ = OQ_+ - OQ_- = (\mathbf{R}_+^{-1} - \mathbf{R}_-^{-1})\mathbf{p}$，这正是位错的Burgers矢量

$$\mathbf{b} = (\mathbf{R}_+^{-1} - \mathbf{R}_-^{-1})\mathbf{p} \qquad (Ⅰ.115)$$

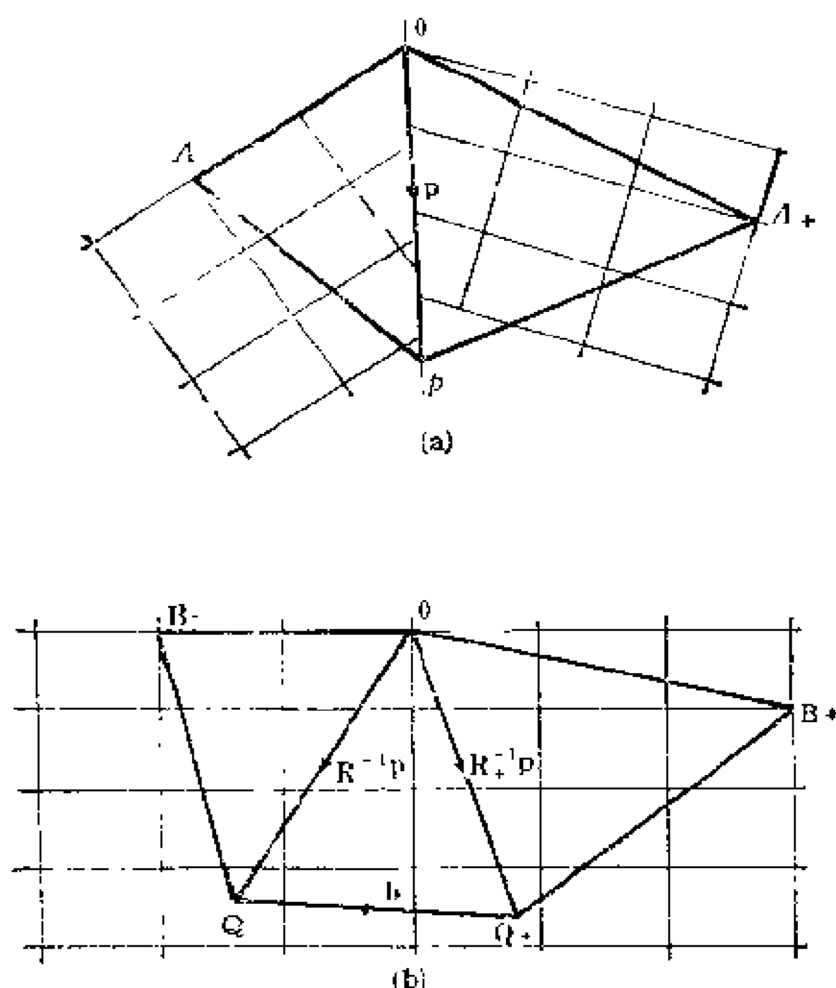


图 Ⅰ.10 用Frank的方法确定晶界的Burgers矢量

(a) 穿过晶界的Burgers回路

(b) 参考晶体中的Burgers回路

如果以负晶体点阵为参考点阵，则

$$\mathbf{b}=-(\mathbf{R}^{-1}-\mathbf{I})\mathbf{p} \qquad (Ⅰ.116)$$

R是晶体相对于负晶体的旋转。如果由参考点阵生成两晶体时不仅限于旋转，而且还有畸变，即若正点阵的基矢

$$\mathbf{a}_i=\mathbf{E}_+\mathbf{c}_i \qquad (Ⅰ.117)$$

其中$\mathbf{c}_i$为参考点阵基矢，$\mathbf{E}_+$为应变为正点阵的变换。负点阵的基矢

$$\bar{\mathbf{a}}_i=\mathbf{E}_-\mathbf{c}_i \qquad (Ⅰ.118)$$

其中$\mathbf{E}_-$为由参考点阵应变为负点阵的变换。则按照上面相似的推理，得

$$\mathbf{b}=(\mathbf{E}_{+}-\mathbf{E}_{-})\mathbf{p} \qquad (\text{Ⅰ}.119)$$

若以负点阵为参考点阵，则得到上述（Ⅰ.114）。其中E是正点阵相对于负点阵的应变。

现在把界面上的位错看作连续分布，在界面上任取单位矢量p，并围绕p作一矩形Burgers回路，两个对边为平行于界面法矢的单位长度线，另两边为平行于p的线，自然一在马氏体内、另一在母相内，由于只有界面上有位错而两侧晶体均完好，因而回路所包围的位错正是p所切割的位错，其Burgers矢量

$$\mathbf{b}=b_i\mathbf{x}_i \qquad (\text{Ⅰ}.120)$$

其中$\mathbf{x}_i$为母相中选定的基矢，则由（Ⅰ.114）得

$$b_i=(E_{ij}-\delta_{ij})p_j \qquad (\text{Ⅰ}.121)$$

这与（Ⅰ.114）一起，是连续分布的界面位错的基本表示式。可以看出，对于界面位错而言，不存在“单根位错线的Burgers矢量”，只有“界面上单位矢量所切割的位错的Burgers矢量”（可类比于空间Burgers回路所包围的Burgers矢量，回路退缩为一条线）。设参考坐标的基矢在母相中选定为$\mathbf{x}_1$，$\mathbf{x}_2$，$\mathbf{x}_3$，位错线平行于单位矢$\mathbf{n}=n_i\mathbf{x}_i$，Burgers矢量平行于单位矢$\mathbf{l}=l_i\mathbf{x}_i$，则此类位错能在$m_i\mathbf{x}_i$为法线的面上滑动，则

$$l_im_i=n_im_i=0 \qquad (\text{Ⅰ}.122)$$

这类位错是“简单滑动界面位错”，是在此引用来描述这一理论的特例。对于界面上不同的单位矢$\mathbf{p}^{(k)}$，所切割的Burgers矢量，在母相参考坐标系中可表为

$$\mathbf{b}^{(k)}=t^{(k)}\mathbf{l}=(\mathbf{E}^{-1}-\mathbf{I})\mathbf{p}^{(k)} \qquad (\text{Ⅰ}.123)$$

设在母相中的参考坐标$\mathbf{x}_i$被选为正交归一系，且为转变应变的主轴系，则转变应变E为

$$\mathbf{E}=\mathbf{R}\mathbf{B} \qquad (\text{Ⅰ}.124)$$

其中B是以η_1，η_2和η_3为对角矩阵元的对角矩阵，是主轴系中的主应变，R为一旋转，于是

$$\mathbf{b}^{(k)}=t^{(k)}\mathbf{l}=(\mathbf{B}^{-1}\mathbf{R}^{-1}-\mathbf{I})\mathbf{p}^{(k)} \qquad (\text{Ⅰ}.125)$$

很明显，若$\mathbf{p}^{(k)}$平行于$\mathbf{n}$，则$t^{(k)}$等于零。

现在说明当界面推移时，这种界面位错的滑动引起的应变是简单切变，在界面位错扫过的区域，晶体因位错滑动发生变形。设母相中有任一矢量$\mathbf{u}$，必可写作$\mathbf{u}=a\mathbf{l}+b\mathbf{p}^{(k)}$，其中$a$和$b$为参数。若界面法矢为$\mathbf{v}'$，则$\mathbf{v}'\mathbf{p}^{(k)}=0$，于是$a=(\mathbf{v}'\mathbf{u})/(\mathbf{v}'\mathbf{l})$。当界面扫过时，$a\mathbf{l}$不发生变化（因平行于Burgers矢量），而$b\mathbf{p}^{(k)}$的末端发生相对位移，等于$b\mathbf{p}^{(k)}$所切割的总的Burgers矢量。因此$b\mathbf{p}^{(k)}$变成$b(\mathbf{p}^{(k)}+t^{(k)}\mathbf{l})$，而$\mathbf{u}$变成$\mathbf{w}=\mathbf{u}+bt^{(k)}\mathbf{l}$。若是$\mathbf{m}'\mathbf{u}=0$，则$\mathbf{p}^{(k)}=\mathbf{n}$（同时在滑移面及界面上），$t^{(k)}=0$且$\mathbf{w}=\mathbf{u}$。令

$$\mathbf{w}=\mathbf{S}\mathbf{u} \tag{Ⅰ.126}$$

其中$\mathbf{S}$为界面位错扫过引起的应变张量矩阵。若$\mathbf{u}$增大一个因子c，则$(\mathbf{w}-\mathbf{u})$及$(\mathbf{m}'\mathbf{u})$均增大因子c，可见这后两者成比例，因而

$$\begin{aligned}\mathbf{w}-\mathbf{u}&=(\mathbf{S}-\mathbf{I})\mathbf{u}=g(\mathbf{m}'\mathbf{u})\mathbf{l}\\&=g\mathbf{l}(\mathbf{m}'\mathbf{u})\\&=g(\mathbf{l}\mathbf{m}')\mathbf{u}\end{aligned} \tag{Ⅰ.127}$$

其中g为比例系数，$(\mathbf{m}'\mathbf{u})$为一标量，故可交换前后位置，而张量又遵守结合律，故得上式，于是

$$\mathbf{S}-\mathbf{I}=g\begin{pmatrix} m_1l_1 & m_2l_1 & m_3l_1\\ m_1l_2 & m_2l_2 & m_3l_2\\ m_1l_3 & m_2l_3 & m_3l_3\end{pmatrix} \tag{Ⅰ.128}$$

对比（Ⅰ.18）可知$\mathbf{S}$为一平面不变应变，又因（Ⅰ.122），知$\mathbf{S}$为简单切变，切变面$\mathbf{m}'$，切变方向$\mathbf{l}$，切变量g。又因

$$\mathbf{w}-\mathbf{u}=bt^{(k)}\mathbf{l}=g(\mathbf{m}'\mathbf{u})\mathbf{l} \tag{Ⅰ.129}$$

而$\mathbf{u}=a\mathbf{l}+b\mathbf{p}^{(k)}$及$\mathbf{m}'\mathbf{l}=0$，得

$$t^{(k)}=g\mathbf{m}'\mathbf{p}^{(k)} \tag{Ⅰ.130}$$

可见位错滑动在$\mathbf{m}'$面上沿$\mathbf{l}$方向引起切变量为g的简单切变。

在界面扫过时，还要发生点阵变化$\mathbf{E}=\mathbf{RB}$，因而矢量$\mathbf{u}$变为$\mathbf{Pu}$，其中

$$\mathbf{P}=\mathbf{RBS} \tag{Ⅰ.131}$$

这个形式与W-L-R理论与B-M理论一样，但到此为止，$\mathbf{P}$只是总

应变，E＝RB只是改变点阵的应变．若证明P是平面不变应变，则E自然是直线不变应变．

现在证明P是平面不变应变．令u为$\mathbf{p}^{(k)}$中任一单位矢（$a=0$，$b=1$），位于一个平行于界面位错的某一平面上，则单是由于位错滑动u变为$\mathbf{S}\mathbf{p}^{(k)}$，此处

$$\mathbf{S}\mathbf{p}^{(k)}=\mathbf{p}^{(k)}+t^{(k)}\mathbf{l} \qquad (\text{I}.132)$$

由（Ⅰ.125）式得

$$\mathbf{S}\mathbf{p}^{(k)}=\mathbf{B}^{-1}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{p}^{(k)} \qquad (\text{I}.133)$$

即

$$\mathbf{RBS}\mathbf{p}^{(k)}=\mathbf{P}\mathbf{p}^{(k)}=\mathbf{p}^{(k)} \qquad (\text{I}.134)$$

因而包含一切$\mathbf{p}^{(k)}$的面，即任何平行于界面的平面均为P的不变面，从而证明P为平面不变应变。到此为止，得到了与W-L-R与B-M理论相同的结果。

下面说明应用这一理论计算惯习面的方法．先决定位错线的单位矢n．由（Ⅰ.125）式取$\mathbf{p}^{(k)}=\mathbf{n}$，$t^{(k)}=0$，则

$$\mathbf{R}'\mathbf{n}=\mathbf{B}\mathbf{n};\quad \mathbf{n}'\mathbf{R}=\mathbf{n}'\mathbf{B}' \qquad (\text{I}.135)$$

因B为对角矩阵，$\mathbf{n}'\mathbf{R}'\mathbf{R}\mathbf{n}=\mathbf{n}'\mathbf{B}'\mathbf{B}\mathbf{n}=\mathbf{n}'\mathbf{B}^2\mathbf{n}$，从而

$$\mathbf{n}'(\mathbf{I}-\mathbf{B}^2)\mathbf{n}=0 \qquad (\text{I}.136)$$

即

$$n_1^2(1-\eta_1^2)+n_2^2(1-\eta_2^2)+n_3^2(1-\eta_3^2)=0 \qquad (\text{I}.137)$$

因位错线n在滑动面m上，因而

$$n_1m_1+n_2m_2+n_3m_3=0 \qquad (\text{I}.138)$$

又因n为单位矢量，即

$$n_1^2+n_2^2+n_3^2=1 \qquad (\text{I}.139)$$

这3式完全对应于B-M理论求长度不变的线矢的方程．这是很明显的，因位错线矢在界面上，而界面是不变面，故n为不变线矢。上面3方程在以下两条件下有4组解：（1）$(1-\eta_1^2)$，$(1-\eta_2^2)$，和$(1-\eta_3^2)$不能有相同的符号；（2）必须满足下式

$$m_1^2(1-\eta_2^2)(1-\eta_3^2)+m_2^2(1-\eta_3^2)(1-\eta_1^2)+m_3^2(1-\eta_1^2)(1-\eta_2^2)\leqslant 0 \qquad (\text{I}.140)$$

界面即惯习面的法矢$\mathbf{v}'$的3分量不同时为0，设ν_3不为零，则可写作$\mathbf{v}'=\nu_3(q_1, q_2, 1)$，其中$q_i=\nu_i/\nu_3$。若$\nu_3$为零，则另用一分量，得到上述形式。

由（Ⅰ.134）式两端乘其转置矩阵，得

$$\mathbf{p}^{(k)\prime}\mathbf{S}'\mathbf{B}^2\mathbf{S}\mathbf{p}^{(k)}=\mathbf{p}^{(k)\prime}\mathbf{p}^{(k)} \qquad (\text{Ⅰ}.141)$$

令$\mathbf{S}'\mathbf{B}^2\mathbf{S}=\mathbf{A}$，则

$$A_{ij}=\sum_{k=1}^{3}\{\eta_k^2(\delta_{ik}+m_i l_k g)(\delta_{kj}+m_j l_k g)\} \qquad (\text{Ⅰ}.142)$$

在（Ⅰ.140）式中，选$\mathbf{p}^{(k)}=\mathbf{p}^{(1)}=\nu_3[0, 1, q_2]$，则

$$h^2P+2h(l_3\eta_3 q_2-l_2\eta_2^2)+(\eta_3^2-1)q_2+\eta_2-1=0 \qquad (\text{Ⅰ}.143)$$

其中

$$P=\sum_{j=1}^{3}l_j^2\eta_j^2 \qquad (\text{Ⅰ}.144)$$

$$h=g(m_3q_2-m_2) \qquad (\text{Ⅰ}.145)$$

把（Ⅰ.125）式左端乘$\mathbf{n}'\mathbf{B}^2$，于是

$$t^{(k)}\mathbf{n}'\mathbf{B}^2\mathbf{l}=\mathbf{n}'(\mathbf{B}\mathbf{R}'-\mathbf{B}^2)\mathbf{p}^{(k)} \qquad (\text{Ⅰ}.146)$$

但由（Ⅰ.135）式

$$\mathbf{n}'\mathbf{B}\mathbf{R}'=\mathbf{n}'\mathbf{R}\mathbf{R}'=\mathbf{n}' \qquad (\text{Ⅰ}.147)$$

于是

$$t(k)\mathbf{n}'\mathbf{B}^2\mathbf{l}=\mathbf{n}'(\mathbf{I}-\mathbf{B}^2)\mathbf{p}^{(k)} \qquad (\text{Ⅰ}.148)$$

现在取$\mathbf{p}^{(k)}=\mathbf{p}^{(2)}=\nu_3[q_2, -q_1, 0]$，由（Ⅰ.130）得$t^{(2)}=g(\nu_2 m_1-\nu_1 m_2)$。且$\mathbf{n}'\mathbf{v}=0$，$q_1$可用下式消去

$$n_1q_1+n_2q_2+n_3=0 \qquad (\text{Ⅰ}.149)$$

在（Ⅰ.148）式中以$\mathbf{p}^{(k)}=\mathbf{p}^{(2)}$代入得

$$hQ=q_2n_3(1-\eta_3^2)-n_2(1-\eta_2^2) \qquad (\text{Ⅰ}.150)$$

$$Q=\sum_{k=1}^{3}l_k n_k\eta_k^2 \qquad (\text{Ⅰ}.151)$$

由（Ⅰ.150）和（Ⅰ.143）消去h，得到一个q_2的二次方程

$$L_3q_2^2+Mq_2+L_2=0 \qquad (\text{Ⅰ}.152)$$

其中

$$L_k = N_k\{N_k P - 2T_k Q - (Q^2/n_k)\} \quad (Ⅰ.153)$$

$$-1/2M = N_2 N_3 P + (N_3 T_2 + N_2 T_3)Q \quad (Ⅰ.154)$$

$$\left.\begin{aligned} N_k &= n_k\ (1-\eta_k^2) \quad & k=2,\ 3 \\ T_k &= l_k \eta_k^2 \quad & k=2,\ 3 \end{aligned}\right\} \quad (Ⅰ.155)$$

（Ⅰ.153）和（Ⅰ.155）中重复的下标k，不用Eienstein约定，不作从1至3的求和。由（Ⅰ.149）和（Ⅰ.152）即可求得惯习面法矢$\nu' = \nu_3(q_1,\ q_2,\ 1)$。以下用还可求得点阵取向关系、总应变、界面取向等等，不再列举。

从计算过程，可以看出这种界面位错理论处理马氏体转变晶体学的一些特点。尽管出发点和推理过程不同，但大体上与W-L-R理论和B-M理论（在$\delta=1$时）等价。这个理论的一个特点是：产生简单切变是由含于界面内的位错（理想化为面上的连续分布）的滑动引起，这就部分地把晶体学与转变机理联系在一起。此外，界面上的位错线矢和Burgers矢量分布可调整，可较灵活地适应实验结果。

Ⅰ.7.2 连续分布位错理论

上面应用的界面位错，是更一般的三维空间的连续分布位错概念的特例。Bilby，Bullough和Smith[6]建立了连续分布位错模型的数学物理基础，主要的思路是把晶体内存在的位错看作连续分布，各点的位错状态是位置的函数；由于各点均处于“位错状态”，不再有“好晶体”，因而无法引入相应的Burgers回路以定义Burgers矢量，但却可把各点的局域坐标与假想的参考点阵相联系，比较两者中的回路以定义位错密度；为便于分析连续位错晶体的几何关系，可把位错态点阵阵点的架形、处理为一个具有单值非对称联络的non-Riemann空间；此仿射联络可借助于联系位错晶体与参考点阵的应变张量（变换矩阵）来表示，并由此非对称联络构成的挠率张量，来定义局域位错密度张量。

对于一个完整晶体，例如对称性最低的三斜晶系，必可引入一个三斜坐标系，以晶胞的三个棱为基矢（参考系），从而描述晶体的结构及每个阵点的位置。若在其中引入连续分布的位错，则点阵扭曲，成为位错晶体。在位错晶体中，每点可建立一个局域的三斜坐标系（局域系），例如以坐标曲线在该点的三根切线矢量为基矢，叫做该点的自然标架。各点的基矢$\mathbf{e}_i$不再相同，故应标出位置，如$\mathbf{e}_i(P)$，$\mathbf{e}_i(Q)$ 等。在位错晶体中，不再有直线，因而也没有平行、距离、方向等概念。现在把原三斜晶体作为参考点阵假想地叠加在位错晶体上，借助于前者在后者中建立平行移动的概念。

由于在叠加而成的晶体中每个点都有两种坐标系，因而在每一点两坐标系的基矢之间必有一个变换关系（变换矩阵）。这种变换关系可以把自然标架的基矢用参考系的基矢表出，反之亦然。这种变换关系虽然每点不同，但却是被规定为连续变化的。这种坐标变换关系，又可以看作应变关系，即此变换矩阵表示把三斜晶体在该点应变为位错晶体的应变张量。请注意概念的差别：某点的矢量可以表为参考系中的矢量，也可表为局域系中的矢量，是同一矢量的两种表示法。在参考点阵中的格矢，可以应变为位错晶体中的格矢，此时是指应变前后的两个不同矢量，仅被（弹性）应变关系联系在一起。为了建立位错晶体中不同点之间的矢量的联系，可把位错晶体在某一点的矢量，表为参考系的矢量，然后在参考点阵中作平移，到了新点后，再变换为（应变为）位错晶体中的矢量，从而定义“平行”，并得到表此空间基本特点的“联络（connexion）”。

为了定义含有连续分布位错的晶体，在每一点P引入表位错晶体的局域系$\mathbf{e}_a(P)$和表参考点阵的参考系$\mathbf{c}_\alpha(P)$，$a,\alpha=1, 2, 3$，（为了考虑最一般的情况，参考系可用曲线坐标）则在位错晶体每点可得

$$\mathbf{e}_a(P)=D_a{}^\alpha(P)\mathbf{c}_\alpha(P) \qquad (Ⅰ.156)$$

自然需假定$D_a{}^\alpha$是单值函数。因为$\mathbf{e}_a(P)$不共面，且矩阵D_a^α非奇异，

故其逆$E^b_\beta(p)$可定义为

$$D^\alpha_a(P)E^b_\alpha(P)=\delta^b_a \qquad (\text{I}.157)$$

$$E^a_\beta(P)D^\alpha_a(P)=\delta^\alpha_\beta \qquad (\text{I}.158)$$

式（1.156）本为坐标变换式，但也可以看作应变的表示式，即把p点的参考点阵的矢量（因引入位错）应变为位错态晶体的矢量。为了了解位错晶体的几何特性，现在考查由相邻两点 P 和Q出发的格矢$p^a\mathbf{e}_a(P)$和$q^a\mathbf{e}_a(Q)$的差矢。设$p^a=q^a$，即两矢在各自的局域坐标系中具有相同的矢量分量。这两个矢量是参考点阵中 P，Q 两点的相同格矢（指长短、方向相同）经位错畸变而成（这是弹性应变）。由于这两局域坐标系不同，故需转换为参考点阵的矢量，以便比较（这是同一矢量的不同表象）。这两矢量在参考系的局域坐标基矢$\mathbf{c}_\alpha(P)$和$\mathbf{c}_\alpha(Q)$中具有分量$\overline{\mathscr{E}}^\alpha(P)$和$\overline{\mathscr{E}}^\alpha(Q)$。（因考虑为曲线坐标，故各点参考基矢可能不同）。于是

$$\overline{\mathscr{E}}^\lambda(P)E^a_\lambda(P)=p^a=q^a=\overline{\mathscr{E}}^\lambda(Q)E^a_\lambda(Q) \qquad (\text{I}.159)$$

则差矢表为由p点出发的矢量为

$$\begin{aligned}\delta\overline{\mathscr{E}}^\mu\mathbf{c}_\mu(P)&=q^a\mathbf{e}_a(Q)-p^a\mathbf{e}_a(P)\\&=\overline{\mathscr{E}}^\lambda(Q)\mathbf{c}_\lambda(Q)-\overline{\mathscr{E}}^\nu(P)\mathbf{c}_\nu(P)\\&=\overline{\mathscr{E}}^\lambda(P)[E^a_\lambda(P)D^\mu_a(Q)\mathbf{c}_\mu(Q)-\mathbf{c}_\lambda(P)]\end{aligned} \qquad (\text{I}.160)$$

这里的推导使用了以下关系

$$\begin{aligned}q^a\mathbf{e}(Q)&=\overline{\mathscr{E}}^\lambda(Q)E^a_\lambda(Q)\mathbf{e}_a(Q)\\&=\overline{\mathscr{E}}^\lambda(Q)\mathbf{c}_\lambda(Q)\\&=\overline{\mathscr{E}}^\lambda(P)E^a_\lambda(P)D^\mu_a(Q)\mathbf{c}_\mu(Q)\end{aligned} \qquad (\text{I}.161)$$

（I.160）式中还含有两个Q点的因子$D^\mu_a(Q)$和$\mathbf{c}_\mu(Q)$，为了化为P点的值，将这两因子沿位错晶体中一曲线$S(x^\nu)$在P点展开、并只保留一级微量，即

$$D^\mu_a(Q)=D^\mu_a(P)+\frac{\partial D^\mu_a}{\partial x^\nu}\bigg|_{(P)}dx^\nu \qquad (\text{I}.162)$$

$$\mathbf{c}_\mu(Q)=\mathbf{c}_\mu(P)+\frac{\partial \mathbf{c}_\mu}{\partial x^\nu}\bigg|_{(P)}dx^\nu \qquad (\text{I}.163)$$

代入(Ⅰ.160)式得

$$\delta\overline{\mathscr{B}}^{\mu}\mathbf{c}_{\mu}(P)-\overline{\mathscr{B}}^{\lambda}(P)\left[\frac{\partial\mathbf{c}_{\lambda}}{\partial x^{\nu}}\bigg|_{(P)}+E_{\lambda}^{a}(P)\frac{\partial D_{a}^{\mu}}{\partial x^{\nu}}\bigg|_{(P)}\mathbf{c}_{\mu}(P)\right]\frac{dx^{\nu}}{ds}\delta s$$

(Ⅰ.164)

其中s为确定曲线S上位置的参数。式中全为P点的参数，故可去掉式中的P标记。取S的曲线坐标为坐标系$\mathbf{c}_{a}$的坐标线$\mathbf{c}^{\nu}$，则因$\frac{\partial\mathbf{c}_{\lambda}}{\partial c^{\nu}}\bigg|_{(P)}$为P点的一个矢量，必可表为该点基矢$\mathbf{c}_{a}$的线性组合，即

$$\frac{\partial\mathbf{c}_{\lambda}}{\partial c^{\nu}}=\left\{{}^{\mu}_{\lambda\nu}\right\}\mathbf{c}_{\mu}(P) \qquad (Ⅰ.165)$$

式中各量全为P点的量，$\left\{{}^{\mu}_{\lambda\nu}\right\}$为在P点的一组常量，有27个分量(不是张量)，称为第二类 Christoffel 记号。于是矢量在位错晶体中沿S线移动所产生的差矢变化为

$$\frac{\delta\overline{\mathscr{B}}^{\mu}}{\delta s}=\left[E_{\lambda}^{a}\frac{\partial D_{a}^{\mu}}{\partial c^{\nu}}+\left\{{}^{\mu}_{\lambda\nu}\right\}\right]\overline{\mathscr{B}}^{\lambda}\frac{dc^{\nu}}{ds}. \qquad (Ⅰ.166)$$

这是位错晶体中点阵矢量的内禀导数表示式，此点阵矢量在各点都有相同的局域晶体学分量，而表在参考系$\mathbf{c}_{a}$中为$\overline{\mathscr{B}}^{\lambda}$。可以看出，$\overline{\mathscr{B}}^{a}$的变化有两部份，一为$D_{a}^{\mu}$随位置变化引起，为式中右端括弧中的第一项，另一为基矢$\mathbf{c}_{a}$的变化引起，为式中右端括弧中的第二项。若采用全空间一致的三斜系参考坐标，第二项自然为零。

现在把上述的、在位错晶体中移动矢量的方式定义为平行移动，则一点与其相邻点的联系是通过$E_{\lambda}^{a}\frac{\partial D_{a}^{\mu}}{\partial c^{\nu}}$。现定义

$$L_{\beta\nu}^{a}=-E_{\beta}^{\lambda}\frac{\partial D_{\lambda}^{a}}{\partial c^{\nu}}=D_{\lambda}^{a}\frac{\partial E_{\beta}^{\lambda}}{\partial c^{\nu}} \qquad (Ⅰ.167)$$

为位错晶体的仿射联络，并很易证明在坐标变换时的变换关系为

$$L_{\beta\nu}^{a}(C)=\frac{\partial c^{a}}{\partial \overline{c}^{\mu}}\left[L_{\lambda\nu}^{\mu}(\overline{C})\frac{\partial\overline{c}^{\lambda}}{\partial c^{\beta}}\frac{\partial\overline{c}^{\nu}}{\partial c^{\nu}}+\frac{\partial^{2}\overline{c}^{\mu}}{\partial c^{\beta}\partial c^{\nu}}\right]. \qquad (Ⅰ.168)$$

符合仿射联络应遵守的变换规则，且此联络为单值，即若移动的矢量表为协变分量，其仿射联络为$M^{\alpha}_{\beta\gamma}$，则可证明

$$M^{\alpha}_{\beta\gamma}=L^{\alpha}_{\beta\gamma} \qquad (\text{I}.169)$$

这样，在位错晶体中引入$L^{\alpha}_{\beta\gamma}$作为仿射联络，因而成为仿射空间。从变换关系可知，仿射联络不是张量，不服从张量的变换规律，但它的特性显示了该空间的特点。对于位错空间，仿射联络是不对称的，即

$$L_{\beta\gamma}^{\alpha}\neq L_{\gamma\beta}^{\alpha} \qquad (\text{I}.170)$$

从而可以定义挠率张量为

$$T^{\alpha}_{\beta\gamma}=\frac{1}{2}[L^{\alpha}_{\beta\gamma}-L^{\alpha}_{\gamma\beta}] \qquad (\text{I}.171)$$

顺便说一句，广义相对论所使用的空间，是一个 Riemann空间，即仿射联络对称，挠率张量处处为零。而位错晶体却被看作一个挠率张量不为零的non-Riemann 空间，比广义相对论的空间更为扭曲，其几何学与欧几里德几何相去更远。然而正是这不为零的挠率张量，表征了位错晶体各点的Burgers矢量。下面要用与普通位错相似的 Burgers 回路，来定义连续分布位错的Burgers矢量。

现在明确假定参考点阵是全空间的三斜点阵，从而可确定一个统一的斜角笛卡尔坐标系，相应的协变基和逆变基分别为$\mathbf{a}_\alpha$，$\mathbf{a}^\alpha$，矢量的逆变分量和协变分量分别为$\mathscr{A}^\alpha$和$\mathscr{A}_\alpha$，相应的变换关系写作$E^{\alpha}_{\lambda}(A,P)$和$D^{\lambda}_{\alpha}(A,P)$。在位错晶体中$P$点取一个任意方向的面积元，作一无限小回路$\Gamma$围绕此面元，回线始点及终点均为$Q$，其坐标为$\mathscr{A}^{\alpha}_{0}$。在此回路上任一点$R$处的一个典型线元是一微步矢量

$$d\overline{\mathscr{A}}^{\alpha}\mathbf{a}_{\alpha}=d\overline{\mathscr{A}}^{\lambda}E^{\alpha}_{\lambda}(A,R)\ \mathbf{e}_{\alpha}(R) \qquad (\text{I}.172)$$

在参考点阵中相应的一个微步是在$\mathbf{a}_\alpha$坐标系中具有相同分量的微步矢$d\mathscr{A}^{\alpha}\mathbf{a}_{\alpha}$，而

$$d\mathscr{A}^{\alpha}=d\overline{\mathscr{A}}^{\lambda}E^{\alpha}_{\lambda}(A,R). \qquad (\text{I}.173)$$

当位错晶体中回路闭合时，参考点阵中相应的回路不闭合，为了闭

合此回路所需的矢量FS，等于上述微步矢 $d\mathscr{A}^\alpha\mathbf{a}_\alpha$ 的总和的负值。求此总和时可用线积分，并把 $d\mathscr{A}^\alpha$ 换为与之相等的 $d\overline{\mathscr{A}}^\lambda E^\alpha_\lambda(A, R)$。对于 $d\overline{\mathscr{A}}^\lambda$ 微步不闭合的回路，对于 $d\overline{\mathscr{A}}^\lambda$ 微步却是闭合的(两者均指在参考系中)，因而

$$\mathbf{FS}=B^\alpha\mathbf{a}_\alpha=\left\{\oint da^\lambda E^\alpha_\lambda(A,R)\right\}\mathbf{a}_\alpha \qquad (\text{Ⅰ}.174)$$

式中用 da^α 取代了 $d\overline{\mathscr{A}}^\alpha$，因两者均为 $\mathbf{a}_\alpha$ 坐标系中的微小矢量，实际意义并无不同。用Stokes定理把回线积分化为面积分

$$\mathbf{FS}=-\left\{\frac{1}{2}\iint_{\Sigma}\left(\frac{\partial E^\alpha_\mu(A)}{\partial a^\lambda}-\frac{\partial E^\alpha_\lambda(A)}{\partial a^\mu}\right)dA^{\lambda\mu}\right\}\mathbf{a}_\alpha \quad (\text{Ⅰ}.175)$$

当各面积元 $\Sigma\to0$ 时，与面元 $dA^{\lambda\mu}$ 相联系的Burgers矢量的分量为

$$B^\alpha(A)=-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial E^\alpha_\mu(A)}{\partial a^\lambda}-\frac{\partial E^\alpha_\lambda(A)}{\partial a^\mu}\right)\bigg|_{(P)}dA^{\lambda\mu} \qquad (\text{Ⅰ}.176)$$

其中 $dA^{\lambda\mu}=da^\lambda\delta a^\mu-da^\mu\delta a^\lambda$ 是面积元在aα坐标系中的张量元素。这里得到的"Burgers矢量" $B^\alpha(A)\mathbf{a}_\alpha$ 是参考点阵中使回路闭合的矢量，此矢量在位错晶体中被应变成"局域Burgers矢量" $\mathscr{B}^a(A)\mathbf{a}_a$，其中

$$\begin{aligned}\mathscr{B}^a(A)&=B^\alpha(A)D^a_\alpha(\text{A, P}) \qquad (\text{Ⅰ}.177)\\&=T^{a}_{\beta\gamma}(A)dA^{\beta\gamma}\end{aligned}$$

其中

$$T^{a}_{\beta\gamma}(A)=\frac{1}{2}D^a_\alpha(A)\left\{\frac{\partial E^\alpha_\beta(A)}{\partial a^\gamma}-\frac{\partial E^\alpha_\gamma(A)}{\partial a^\beta}\right\} \quad (\text{Ⅰ}.178)$$

正是前面(Ⅰ.171)表示的、由联络 $L^a_{\beta\gamma}$ 所定义的挠率张量。

由所得到的挠率张量以及连续分布位错的Buegers矢量，应用于导出，可以得到前面的(Ⅰ.114)，(Ⅰ.119)和(Ⅰ.121)式，这是B-B-S理论的发展过程。但这些推导过程需小心地进行，不像直观感到的那么简单。具体推导可参见[13,14]。

参 考 文 献

[1] M.S. Wechsler, D.S. Lieberman and T. A. Read, On the Theory of the Formation of Martensite, *Trans. AIME*, 197 (1953), pp. 1503—1515.

[2] D.S. Lieberman, M.S. Wechsler and T.A. Read, Cubic to Orthorhombic Diffusionless Phase Change-Experimentaland Theoretical Studies of AuCd, *J. Applied Physics*, 26(1955), pp.473—484.

[3] J.S. Bowles and J. K. Mackenzie, The Crystallography of Martensite Transformations I, *Acta Metall.*, 2(1954), 3, pp.129—137.

[4] J.K. Mackenzie and J.S. Bowles, The Crystallography of Martensite Transformations Ⅱ, *Acta Metall.*, 2 (1954), 3, pp. 138—147.

[5] J. S. Bowles and J.K. Mackenzie, The Crystallography of Martensite Transformations Ⅲ, *Acta Metall.*, 2 (1954), 3, pp. 225—234.

[6] B. A. Bilby, R. Bullough and E. Smith, Continuous Distributions of Dislocations: A New Application of the Methods of non-Riemannian Geometry, *Proc. Roy. Soc.*, A231 (1955), pp. 263 273.

[7] R. Bullough and B.A. Bilby, Continuous Distributions of Dislocations: Surface Dislocation and the Crystallography of Martensitic Transformations, *Proc. Phys. Soc.*, B69 (1956) pp.1276—1286.

[8] C.M. Wayman, Introduction to the Crystallography of Martensitic Transformations, The MacMillan Co. New York, 1964.

[9] K.M. Knowles and D.A. Smith, The Nature of the Parent-Martensite Interface in Titanium-Manganese, *Acta Metall.*, 29 (1981), pp.1445—1466.

[10] H.M. Ledbetter and C.M. Wayman, A Computer Program for Martensite Crystallography, *Materials Science and Engineering*, 7 (1971), pp. 151—157.

[11] E.C. Bain, The Nature of Martensite, *Trans. AIME*, 70(1924), pp.25—46.

[12] J.K. Mackenzie and J.S. Bowles, The Crystallography of Martensite Transformations—ⅣBody-Centered Cubic to Orthorhombic Transformations, *Acta Metall.*, 5 (1957), pp. 137—149.

[13] B.A. Bilby, Types of Dislocation Source, Report of Bristol Conference on Defects in Crystalline Solids, 1955, pp.124—133.

[14] J.W. Christian, The Theory of Transformations in Metals and Alloys, Second Edition, Pergamon Press, Oxford, New York, 1975, pp. 311—342.

附录Ⅱ 张量、矩阵和应变

Ⅱ.1 基本概念

张量是在坐标系变换中保持不变的量，其分量按一定规则变换．矩阵是按一定规则排列的数据的阵列．在本书的范围，研究对象是客观现实三维空间中的材料体系，所涉及的张量只有零维、一维和二维张量，以及它们的代数运算．三维欧几里德空间中的零维张量为标量，如密度、温度等；一维张量为矢量，有3个分量，如位矢、位移、力等；二维张量有9个分量，如应力、应变等．在三维空间中，这三种张量均可表示为矩阵，零维张量是只有一个元素的矩阵，一维张量$\mathbf{v}$可表为

$$\mathbf{v}=\begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{bmatrix} \quad 或\mathbf{v}'=[v_1, v_2, v_3] \qquad (Ⅱ.1)$$

二维张量可表为

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \qquad (Ⅱ.2)$$

以后零维张量称标量，一维张量称矢量，用小写黑体字母表示；二维张量简称张量，用大写黑体字母表示，其分量用斜体字表示．在本书范围，张量均可用矩阵表示，两者有一一对应关系，故不再严加区分．有以下几种常见的特殊矩阵：

1．单位矩阵

$$\mathbf{I}=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad (Ⅱ.3)$$

2. 对角矩阵，有 3 个独立元素

$$\mathbf{A}_1=\begin{bmatrix} a_1 & 0 & 0 \\ 0 & a_2 & 0 \\ 0 & 0 & a_3 \end{bmatrix} \tag{Ⅱ.4}$$

3. 对称矩阵，有 6 个立独元素

$$\mathbf{A}_2=\begin{bmatrix} a_1 & a_4 & a_5 \\ a_4 & a_2 & a_6 \\ a_5 & a_6 & a_3 \end{bmatrix} \tag{Ⅱ.5}$$

4. 反称矩阵，有 3 个独立元素，相当于一个矢量

$$\mathbf{A}_3=\begin{bmatrix} 0 & a_4 & a_5 \\ -a_4 & 0 & a_6 \\ -a_5 & -a_6 & 0 \end{bmatrix} \tag{Ⅱ.6}$$

5. 正交矩阵（幺正矩阵），有 3 个独立元素

$$\mathbf{A}_4=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \tag{Ⅱ.7}$$

其中

$$a_{ik}a_{jk}=\begin{cases} 1 & i=j \\ 0 & i\neq j \end{cases} \tag{Ⅱ.8}$$

其中$i,j,k=1,2,3$，本章使用 Einstein约定，重复的下标由 1 至 3 求和。这种矩阵也等价于一个矢量。

把一个矩阵的行（横排）和列（竖排）互换，叫作矩阵的转置，以“′”号表示。若A为（Ⅱ.2）的矩阵，则其转置矩阵为

$$\mathbf{A}'=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} \\ a_{12} & a_{22} & a_{32} \\ a_{13} & a_{23} & a_{33} \end{bmatrix} \tag{Ⅱ.9}$$

关于转置有以下规律

$$\begin{aligned} &(\mathbf{A}')'=\mathbf{A} \\ &(\mathbf{A}+\mathbf{B})'=\mathbf{A}'+\mathbf{B}' \\ &(\alpha\mathbf{A})'=\alpha\mathbf{A}' \qquad \alpha\text{为标量} \\ &(\mathbf{AB})'=\mathbf{B}'\mathbf{A}' \end{aligned} \tag{Ⅱ.10}$$

下面介绍应变张量。连续介质中各点的位移，可能来源于刚体平移、刚体旋转、或形变。固体的变形可能由膨胀(体积变化)或畸变（形状变化）构成。因为形变和移动，使点Q(x,y,z)位移至Q′$(x+u,y+v,z+w)$。位移分量为u,v,w，位移矢量为 $\mathbf{d}=(u\mathbf{i}+v\mathbf{j}+w\mathbf{k})$，其中$\mathbf{i},\mathbf{j},\mathbf{k}$为基矢，而$u,v,w$均为坐标$x,y,z$的函数。如果位移矢量对物体所有的点均为常数，则物体未遭应变。当$\mathbf{d}$对各点不是常数时，则应变张量可以按如下程序定义，

$$\left.\begin{aligned} u&=e_{11}x+e_{12}y+e_{13}z \\ v&=e_{21}x+e_{22}y+e_{23}z \\ w&=e_{31}x+e_{32}y+e_{33}z \end{aligned}\right\} \tag{Ⅱ.11}$$

其中

$$\left.\begin{aligned} e_{11}&=\frac{\partial u}{\partial x},\quad e_{12}=\frac{\partial u}{\partial y},\quad e_{13}=\frac{\partial u}{\partial z} \\ e_{21}&=\frac{\partial v}{\partial x},\quad e_{22}=\frac{\partial v}{\partial y},\quad e_{23}=\frac{\partial v}{\partial z} \\ e_{31}&=\frac{\partial w}{\partial x},\quad e_{32}=\frac{\partial w}{\partial y},\quad e_{33}=\frac{\partial w}{\partial z} \end{aligned}\right\} \tag{Ⅱ.12}$$

张量

$$\mathbf{E}=\begin{pmatrix} e_{11} & e_{12} & e_{13} \\ e_{21} & e_{22} & e_{23} \\ e_{31} & e_{32} & e_{33} \end{pmatrix} \tag{Ⅱ.13}$$

称为相对位移张量或位移梯度张量，可分解为对称及反称部分

$$\begin{aligned} \mathbf{E}&=\frac{1}{2}(\mathbf{E}+\mathbf{E}')+\frac{1}{2}(\mathbf{E}-\mathbf{E}') \\ &=\mathbf{E}_0+\mathbf{R} \end{aligned} \tag{Ⅱ.14}$$

其中对称部分

$$\mathbf{E}_0=\frac{1}{2}(\mathbf{E}+\mathbf{E}') \tag{Ⅱ.15}$$

所构成的张量称为应变张量，而反称部分

$$R = \frac{1}{2}(E + E') \tag{Ⅱ.16}$$

所构成的张量称为转动张量，代表刚体旋转。在本书中，按照处理这类问题的文献的习惯，不去严格区分E（相对 位移张量）与E_0（应变张量），把两者均称 为（广义 的）“应变张量”，也即并不是总是把转动部分分离出来。很容 易证明，物 体中 一矢量r，经应变后为$\bar{r}$则

$$\begin{aligned}\bar{r} &= (T + E_0 + R)r \\ &= Ar \end{aligned} \tag{Ⅱ.17}$$

其中

$$A = T + E_0 + R \tag{Ⅱ.18}$$

其中T表刚性平移，E_0表纯粹的畸变（应变），R表刚性旋转。

Ⅱ.2　矩阵的代数运算

1。矩阵加法（减法）。只有行和列的数目均相同的矩阵之间才能进行加法（减法）运算

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}; \quad B = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & a_{23} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} \end{bmatrix} \tag{Ⅱ.19}$$

$$A \pm B = \begin{bmatrix} a_{11} \pm b_{11} & a_{12} \pm b_{12} & a_{13} \pm b_{13} \\ a_{21} \pm b_{21} & a_{22} \pm b_{22} & a_{23} \pm b_{23} \\ a_{31} \pm b_{31} & a_{32} \pm b_{32} & a_{33} \pm b_{33} \end{bmatrix} \tag{Ⅱ.20}$$

2。矩阵的数乘。

$$\alpha A = \begin{bmatrix} \alpha a_{11} & \alpha a_{12} & \alpha a_{13} \\ \alpha a_{21} & \alpha a_{22} & \alpha a_{23} \\ \alpha a_{31} & \alpha a_{32} & \alpha a_{33} \end{bmatrix} \tag{Ⅱ.21}$$

其中α为标量

3。矩阵乘法。只有前一矩阵 的 列数等于后一矩阵的行数，这两矩阵才能作乘法运算

$$\mathbf{v}=\begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{bmatrix} \qquad \mathbf{v}'=[v_1 \ \ v_2 \ \ v_3]$$

A为（Ⅱ.2）式的矩阵，则

$$\mathbf{Av}=\begin{bmatrix} a_{11}v_1+a_{12}v_2+a_{13}v_3 \\ a_{21}v_1+a_{22}v_2+a_{23}v_3 \\ a_{31}v_1+a_{32}v_2+a_{33}v_3 \end{bmatrix} \qquad (Ⅱ.22)$$

$$\mathbf{v}'\mathbf{A}=\begin{bmatrix} v_1a_{11}+v_2a_{21}+v_3a_{31}, \\ v_1a_{21}+v_2a_{22}+v_3a_{23}, \\ v_1a_{31}+v_2a_{32}+v_3a_{33} \end{bmatrix} \qquad (Ⅱ.23)$$

B为（Ⅱ.19）式的矩阵，则**AB**＝

$$\begin{bmatrix} \begin{pmatrix} a_{11}b_{11}+a_{12}b_{21} \\ +a_{13}b_{31} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} a_{11}b_{12}+a_{12}b_{22} \\ +a_{13}b_{32} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} a_{11}b_{13}+a_{12}b_{23} \\ +a_{13}b_{33} \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} a_{21}b_{11}+a_{22}b_{21} \\ +a_{23}b_{31} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} a_{21}b_{12}+a_{22}b_{22} \\ +a_{23}b_{32} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} a_{21}b_{13}+a_{22}b_{23} \\ +a_{23}b_{33} \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} a_{31}b_{11}+a_{32}b_{21} \\ +a_{33}b_{31} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} a_{31}b_{12}+a_{32}b_{22} \\ +a_{33}b_{32} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} a_{31}b_{13}+a_{32}b_{23} \\ +a_{33}b_{33} \end{pmatrix} \end{bmatrix} \qquad (Ⅱ.24)$$

可以看出，矩阵乘法不能改变顺序，即不服从交换律。一般而言

$$\mathbf{AB}\neq\mathbf{BA} \qquad (Ⅱ.25)$$

但服从结合律

$$\mathbf{ABC}=\mathbf{A}(\mathbf{BC})=(\mathbf{AB})\mathbf{C} \qquad (Ⅱ.26)$$

及分配律

$$\mathbf{A}(\mathbf{B}+\mathbf{C})=\mathbf{AB}+\mathbf{AC} \qquad (Ⅱ.27)$$

注意，若

$$\mathbf{AB}=\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad (Ⅱ.28)$$

不能得出**A**或**B**的全部元素为 0 的结论。同样，**AB**＝**AC**不能得出结论**B**＝**C**。

4. 张量矩阵的并矢积（外积）。

$$\mathbf{D}=\mathbf{d}\mathbf{p}' \qquad (\text{Ⅱ}.29)$$

其中

$$\mathbf{d}=\begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{p}'=[p_1 \ \ p_2 \ \ p_3] \qquad (\text{Ⅱ}.30)$$

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix} d_1p_1 & d_1p_2 & d_1p_3 \\ d_2p_1 & d_2p_2 & d_2p_3 \\ d_3p_1 & d_3p_2 & d_3p_3 \end{bmatrix} \qquad (\text{Ⅱ}.31)$$

两矢量的内积为标量

$$\mathbf{p}'\mathbf{d}=p_1d_1+p_2d_2+p_3d_3 \qquad (\text{Ⅱ}.32)$$

两个矢量的叉积得到一矢量，与原两矢量垂直。

$$\mathbf{v}=\mathbf{p}\times\mathbf{d}=\begin{bmatrix} p_2d_3-p_3d_2 \\ p_3d_1-p_1d_3 \\ p_1d_2-p_2d_1 \end{bmatrix} \qquad (\text{Ⅱ}.33)$$

5. 矩阵的逆。矩阵的行列式

$$\det\mathbf{A}=|\mathbf{A}|=\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} \qquad (\text{Ⅱ}.34)$$

若不为零，称为非奇异矩阵。对非奇异矩阵可以定义逆矩阵。若

$$\mathbf{A}\mathbf{B}=\mathbf{I} \qquad (\text{Ⅱ}.35)$$

其中$\mathbf{I}$为单位矩阵，则矩阵$\mathbf{B}$称为$\mathbf{A}$的逆矩阵，记作$\mathbf{A}^{-1}$。$\mathbf{B}$为$\mathbf{A}$的逆矩阵，则$\mathbf{A}$也是$\mathbf{B}$的逆矩阵，即

$$\mathbf{A}=\mathbf{B}^{-1}=(\mathbf{A}^{-1})^{-1}, \qquad (\text{Ⅱ}.36)$$

且若

$$\mathbf{A}=\mathbf{F}\mathbf{C}$$

有

$$\mathbf{A}^{-1}=(\mathbf{F}\mathbf{C})^{-1}=\mathbf{C}^{-1}\mathbf{F}^{-1} \qquad (\text{Ⅱ}.36')$$

及

$$(\mathbf{A}')^{-1}=(\mathbf{A}^{-1})' \qquad (\text{Ⅱ}.36'')$$

现在由矩阵A表出其逆矩阵。定义一个矩阵A的行列式在去掉第i行和第j列后的二行二式行列式的值为余子M_{ij}，再乘$(-1)^{i+j}$称为矩阵的代数余子式A_{ij}，例如

$$
A_{11}=M_{11}=\begin{vmatrix} a_{22} & a_{23} \\ a_{32} & a_{33} \end{vmatrix}
$$

$$
A_{12}=-M_{12}=-\begin{vmatrix} a_{21} & a_{23} \\ a_{31} & a_{33} \end{vmatrix} \qquad (\text{Ⅱ}.37)
$$

$$
A_{22}=M_{22}=\begin{vmatrix} a_{11} & a_{13} \\ a_{31} & a_{33} \end{vmatrix}
$$

$$
A_{32}=-M_{32}=-\begin{vmatrix} a_{11} & a_{13} \\ a_{21} & a_{23} \end{vmatrix}
$$

等等。A若为非奇异矩阵，则其逆为

$$
A^{-1}=\frac{1}{|A|}\begin{pmatrix} A_{11} & A_{21} & A_{31} \\ A_{12} & A_{22} & A_{32} \\ A_{13} & A_{23} & A_{33} \end{pmatrix} \qquad (\text{Ⅱ}.38)
$$

特别需注意此矩阵各元素的下标与A的元素下标的“转置”对应关系。

Ⅱ.3 线性变换

在不同坐标系中，一个张量的表象（各分量的值）是不同的，相互间遵循一定的变换规律。若有两个直角坐标系x系和$\bar{x}$系，基矢分别为$(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\mathbf{x}_3)$和$(\bar{\mathbf{x}}_1,\bar{\mathbf{x}}_2,\bar{\mathbf{x}}_3)$，其变换关系为

$$
\begin{aligned}
\bar{\mathbf{x}}_1&=a_{11}\mathbf{x}_1+a_{12}\mathbf{x}_2+a_{13}\mathbf{x}_3\\
\bar{\mathbf{x}}_2&=a_{21}\mathbf{x}_1+a_{22}\mathbf{x}_2+a_{23}\mathbf{x}_3\\
\bar{\mathbf{x}}_3&=a_{31}\mathbf{x}_1+a_{32}\mathbf{x}_2+a_{33}\mathbf{x}_3
\end{aligned} \qquad (\text{Ⅱ}.39)
$$

其中$a_{ij}(i,j=1,2,3)$为$\bar{x}$系的基矢在x系中的分量。上式可写作

$$\begin{bmatrix} \bar{\mathbf{x}}_1 \\ \bar{\mathbf{x}}_2 \\ \bar{\mathbf{x}}_3 \end{bmatrix} = \mathbf{A} \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \\ \mathbf{x}_3 \end{bmatrix} \tag{Ⅱ.40}$$

其变换矩阵为

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \tag{Ⅱ.41}$$

同样，若

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_1 &= b_{11}\bar{\mathbf{x}}_1 + b_{12}\bar{\mathbf{x}}_2 + b_{13}\bar{\mathbf{x}}_3 \\ \mathbf{x}_2 &= b_{21}\bar{\mathbf{x}}_1 + b_{22}\bar{\mathbf{x}}_2 + b_{23}\bar{\mathbf{x}}_3 \\ \mathbf{x}_3 &= b_{31}\bar{\mathbf{x}}_1 + b_{32}\bar{\mathbf{x}}_2 + b_{33}\bar{\mathbf{x}}_3 \end{aligned} \tag{Ⅱ.42}$$

其中$b_{ij}(i,j=1,2,3)$为x系的三个基矢在$\bar{\mathbf{x}}$系中的分量。上式可写成

$$\begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \\ \mathbf{x}_3 \end{bmatrix} = \mathbf{B} \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{x}}_1 \\ \bar{\mathbf{x}}_2 \\ \bar{\mathbf{x}}_3 \end{bmatrix} \tag{Ⅱ.43}$$

其中变换矩阵为（很明显，A和B互为逆矩阵）

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} \end{bmatrix} \tag{Ⅱ.44}$$

矢量v在坐标变换下的分量为

$$\begin{bmatrix} \bar{v}_1 \\ \bar{v}_2 \\ \bar{v}_3 \end{bmatrix}_{\bar{x}} = (\mathbf{A}')^{-1} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{bmatrix}_{x} \tag{Ⅱ.45}$$

$$\begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{bmatrix}_{x} = (\mathbf{B}')^{-1} \begin{bmatrix} \bar{v}_1 \\ \bar{v}_2 \\ \bar{v}_3 \end{bmatrix}_{\bar{x}} \tag{Ⅱ.46}$$

可以看出，空间矢量v的分量的变换，与基矢的变换规律相反，被称为逆变矢量。凡与基矢的变换规律相同的，称为协变矢量。以

后会证明，一个面的法线矢量，就是属于协变矢量

矩阵**A**除表坐标变换的矩阵外，也可以表示其他二阶张量，如应力、应变等。若**A**表一个应变张量，则$\bar{\mathbf{x}}=\mathbf{A}\mathbf{x}$表矢量$\mathbf{x}$经应变后变成另一矢量$\bar{\mathbf{x}}$。这在意义上与坐标变换不同，后者是表同一矢量（方向、长度固定）在不同坐标系下的不同表示，而前者为矢量变换，表示一矢量经外界作用后，变成了另一个矢量（方向、长度都可能不同）。但这两者的数学形式是相同的，故在应用时，应从物理考虑上严格区分两者。

现在举两个简单的例子，一个是绕坐标轴x_1的旋转，这可表示坐标系的旋转（矢量不动），也可表一矢量的旋转（坐标系不动）。设如图Ⅱ.1所示转动的角为θ，则

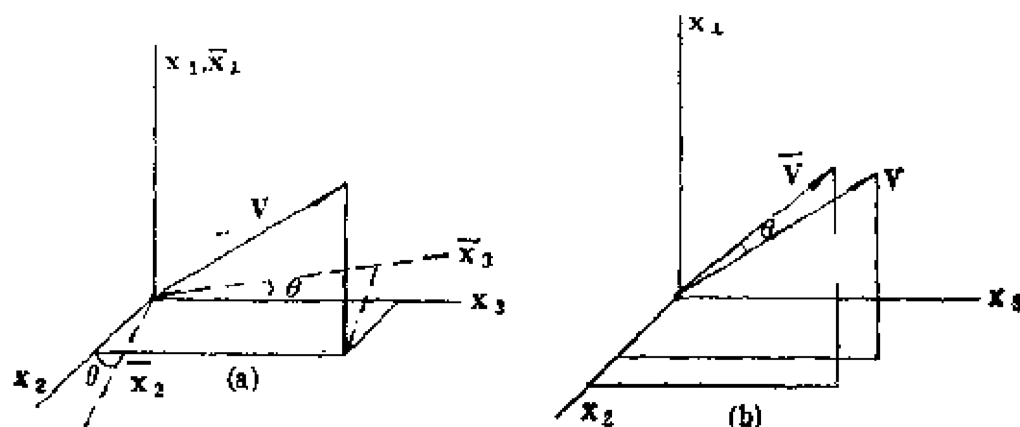


图 Ⅱ.1　(a) 坐标系绕x_1轴的旋转 (b) 矢量绕x_1轴的旋转

$$\begin{bmatrix}\bar{v}_1\\ \bar{v}_2\\ \bar{v}_3\end{bmatrix}_{\bar{x}}=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & \cos\theta & -\sin\theta\\ 0 & \sin\theta & \cos\theta\end{bmatrix}\begin{bmatrix}v_1\\ v_2\\ v_3\end{bmatrix}_x \qquad (Ⅱ.47)$$

另一个例子如图Ⅱ.2所示，可以表示由直角系变换为斜角系的坐标变换，也可以是表物体发生了简单切变的矢量变换。变换关系为

$$\begin{bmatrix}\bar{v}_1\\ \bar{v}_2\\ \bar{v}_3\end{bmatrix}_{\bar{x}}=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & t\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}v_1\\ v_2\\ v_3\end{bmatrix}_x \qquad (Ⅱ.48)$$

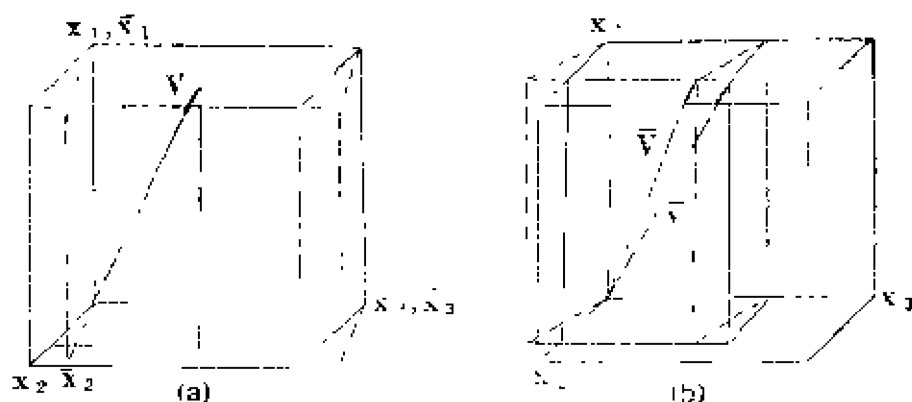


图 Ⅱ.2 (a) 坐标系的切变 (b) 矢量的切变

现在说明二阶张量C的变换关系，若变换矩阵为A，C遵从以下的变换

$$\bar{C} = A^{-1}CA \tag{Ⅱ.49}$$

这里所表示的，可能是坐标变换，即张量C表在新坐标系中的表象；也可能是张量本身的变化，即在外界作用下，例如发生应变，张量C所表征的物理量变成了 $\bar{C}$，而坐标系统未变。例如，坐标旋转θ角后，新的张量为

$$\bar{C} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & \sin\theta \\ 0 & -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & -\sin\theta \\ 0 & \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \tag{Ⅱ.50}$$

又如物体经简单切变后，与之固定联系的张量C变为

$$\bar{C} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -t \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & t \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{Ⅱ.51}$$

在马氏体转变的晶体学唯象理论中经常碰到的情况是绕任意轴旋转，如图Ⅱ.3所示。在一空间坐标系x中，绕 x_1 轴旋转的变换矩阵为

$$\mathbf{R}_0=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & \cos\theta & -\sin\theta\\ 0 & \sin\theta & \cos\theta\end{pmatrix} \qquad (\mathrm{II}.52)$$

由于这是一个正交矩阵，因而$\mathbf{R}_0^{-1}=\mathbf{R}_0'$。现在要求绕任意轴$\mathbf{P}(p_1,p_2,p_3)$旋转$\theta$角的变换矩阵。一种简便的方法是建立一个新的坐标系$x$，其第一轴$\mathbf{x}_1$即为归一化后的P。也即旋转坐标系，使$\mathbf{x}_1$与P重合，则在新坐标系$\mathbf{x}$中，旋转具有上面(Ⅱ.52)的简单形式，即

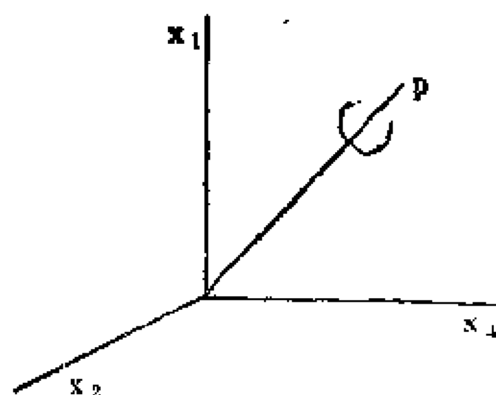


图 Ⅱ.3 绕任意轴p的旋转

$$\mathbf{R}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & \cos\theta & -\sin\theta\\ 0 & \sin\theta & \cos\theta\end{pmatrix} \qquad (\mathrm{II}.53)$$

此旋转在原坐标系x中的形式应为

$$\mathbf{R}=\mathbf{ARA}' \qquad (\mathrm{II}.54)$$

其中A为轴旧坐标系变换为新坐标系的变换矩阵(此处仅为旋转)

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix}a_{11} & a_{21} & a_{31}\\ a_{12} & a_{22} & a_{32}\\ a_{13} & a_{23} & a_{33}\end{pmatrix} \qquad (\mathrm{II}.55)$$

因为新旧坐标相差一个旋转，故变换矩阵为正交矩阵，即

$$\mathbf{A}^{-1}=\mathbf{A}' \qquad (\mathrm{II}.56)$$

其中第一列为$\mathbf{x}_1$（即归一化后的P）在x坐标系中的方向余弦，第二、三列分别为$\mathbf{x}_2$和$\mathbf{x}_3$在x坐标系中的方向余弦。由于一个旋转的正交矩阵只有3个独立分量，故从原则上来说，（Ⅱ.55）式必可解出，即

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix}a_{11} & a_{21} & a_{31}\\ a_{12} & a_{22} & a_{32}\\ a_{13} & a_{23} & a_{33}\end{pmatrix}=\mathbf{ARA}'$$

$$=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} \\ a_{12} & a_{22} & a_{32} \\ a_{13} & a_{23} & a_{33} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \qquad (Ⅱ.57)$$

若P已归一化（即为单位矢量），其分量在x坐标系中为p_1, p_2, p_3，则

$$r_{ij}=\delta_{ij}\cos\theta + p_i p_j(1-\cos\theta)\varepsilon_{ijk}p_k\sin\theta \qquad (Ⅱ.58)$$

其中下标$i, j=1,2,3$；δ_{ij}为Kroneker符号

$$\delta_{ij}=\begin{cases} 1 & i=j \\ 0 & i\neq j \end{cases} \qquad (Ⅱ.59)$$

ε_{ijk}为一个特殊的张量

$$\varepsilon_{ijk}=\begin{cases} +1, & \text{当 } (ijk) \text{ 是 } (123) \text{ 的偶置换} \\ -1, & \text{当 } (ijk) \text{ 是 } (123) \text{ 的奇置换} \\ 0, & \text{其他情况} \end{cases} \qquad (Ⅱ.60)$$

例如

$$\varepsilon_{123}=\varepsilon_{132}=\varepsilon_{321}=-1$$

因以上的下标均经奇数次置换得到。而

$$\varepsilon_{112}=\varepsilon_{133}=\varepsilon_{111}=0$$

也可以把（Ⅱ.58）式写成明的形式

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix} \begin{bmatrix} p_1^2(1-\cos\theta) \\ +\cos\theta \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} p_1 p_2(1-\cos\theta) \\ -p_3\sin\theta \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} p_1 p_3(1-\cos\theta) \\ +p_2\sin\theta \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} p_2 p_1(1-\cos\theta) \\ +p_3\sin\theta \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} p_2^2(1-\cos\theta) \\ +\cos\theta \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} p_2 p_3(1-\cos\theta) \\ -p_1\sin\theta \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} p_3 p_1(1-\cos\theta) \\ -p_2\sin\theta \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} p_3 p_2(1-\cos\theta) \\ +p_1\sin\theta \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} p_3^2(1-\cos\theta) \\ +\cos\theta \end{bmatrix} \end{bmatrix}$$

（Ⅱ.61）

Ⅱ.4 倒易矢量

在处理四方、正交等晶系时，用三轴单位矢不等长的直角坐

标系较方便。处理单斜、六方、三斜等晶系时，则用斜角坐标比较方便。现在考查三轴斜交，且三轴的单位矢不等长的情况。在直角坐标中，矢量x的长度平方为

$$1^2=|\mathbf{x}|^2=\mathbf{x}'\mathbf{x} \qquad (\text{Ⅱ}.62)$$

若在一个斜交坐标系中，此矢量x为$\bar{\mathbf{x}}$，则

$$\mathbf{x}=\mathbf{A}\bar{\mathbf{x}}$$

其中A为变换矩阵，则矢量的长度平方为

$$1^2=\mathbf{x}'\mathbf{x}=\bar{\mathbf{x}}'\mathbf{A}'\mathbf{A}\bar{\mathbf{x}}=\bar{\mathbf{x}}\mathbf{G}\bar{\mathbf{x}} \qquad (\text{Ⅱ}.63)$$

其中矩阵G＝A′A称为坐标系$\bar{\mathbf{x}}$的度规张量，必为对称矩阵。对于直角笛卡尔坐标系（三轴直交、三基矢长度为1），则A′A＝I，x′x＝xx。但在一般情况下（三斜系），

$$G=\mathbf{A}\mathbf{A}'$$

$$=\begin{pmatrix} a_{11}^2+a_{21}^2+a_{31}^2 & a_{11}a_{12}+a_{21}a_{22}+a_{31}a_{32} & a_{11}a_{13}+a_{21}a_{23}+a_{31}a_{33} \\ a_{12}a_{11}+a_{22}a_{21}+a_{32}a_{31} & a_{12}^2+a_{22}^2+a_{32}^2 & a_{12}a_{13}+a_{22}a_{23}+a_{32}a_{33} \\ a_{13}a_{11}+a_{23}a_{21}+a_{33}a_{31} & a_{13}a_{12}+a_{23}a_{22}+a_{33}a_{32} & a_{13}^2+a_{23}^2+a_{33}^2 \end{pmatrix}$$

$$(\text{Ⅱ}.64)$$

即G中的元素

$$g_{ij}=a_{1i}a_{1j}+a_{2i}a_{2j}+a_{3i}+a_{3j}$$

$$=a_{ri}a_{rj} \qquad i,\ j,\ r=1,\ 2,\ 3 \qquad (\text{Ⅱ}.65)$$

对于正交归一的坐标系，度规张量G为单位矩阵I。G的所有元素为常数的坐标系称笛卡尔坐标，G为对角矩阵的坐标系称直角笛卡尔坐标。

现在考虑两矢量间角度的表示，如图Ⅱ.2所示，OA＝x，OB＝y均为任意坐标系中自原点出发的单位矢量。对于三角形OAB，

$$(AB)^2=(OA)^2+(OB)^2-2(OA)(OB)\cos\theta$$

$$=2(1-\cos\theta) \qquad (\text{Ⅱ}.66)$$

但

$$\mathbf{AB}=\begin{bmatrix} x_r - y_r \\ x_s - y_s \end{bmatrix}; \quad (\mathbf{AB})'=[x_r - y_r \quad x_s - y_s] \tag{Ⅱ.67}$$

r和s分别表在两轴r和s上的分量，从而

$$|\mathbf{AB}|^2=(x_r \quad y_r \quad x_s - y_s)\begin{bmatrix} g_{rr} & g_{rs} \\ g_{sr} & g_{ss} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_r - y_r \\ x_s - y_s \end{bmatrix}$$

$$=g_{rs}(x_r - y_r)(x_s - y_s)$$

$$=2(1 - g_{rs}x_r y_s) \tag{Ⅱ.68}$$

因而

$$\cos\theta=g_{rs}x_r y_s \tag{Ⅱ.69}$$

若x，y不为单位矢，则

$$\cos\theta=g_{rs}x_r y_s/(|\mathbf{x}||\mathbf{y}|)$$

因而两矢量x和y正交的条件是

$$g_{rs}x_r y_s=0 \tag{Ⅱ.70}$$

或者等价地

$$\mathbf{x}'\mathbf{G}\mathbf{y}=\mathbf{y}'\mathbf{G}\mathbf{x}=0 \tag{Ⅱ.71}$$

现在引入倒易空间和倒易基矢。三个不共面的矢量$\mathbf{a}_1$，$\mathbf{a}_2$，和$\mathbf{a}_3$成为一组基矢，所形成的平行六面体体积

$$v=\mathbf{a}_1\times\mathbf{a}_2\cdot\mathbf{a}_3=\mathbf{a}_1\cdot\mathbf{a}_2\times\mathbf{a}_3 \tag{Ⅱ.72}$$

引入倒易基矢$\mathbf{a}_1^*$，$\mathbf{a}_2^*$和$\mathbf{a}_3^*$如下

$$\left.\begin{aligned} a_1^* &= \frac{a_2\times a_3}{v} \\ a_2^* &= \frac{a_3\times a_1}{v} \\ a_3^* &= \frac{a_1\times a_2}{v} \end{aligned}\right\} \tag{Ⅱ.73}$$

相应的平行六面体

$$v^*=\mathbf{a}_1^*\times\mathbf{a}_2^*\cdot\mathbf{a}_3^*=\mathbf{a}_1^*\cdot\mathbf{a}_2^*\times\mathbf{a}_3^* \tag{Ⅱ.74}$$

则

$$v^* = \frac{1}{v} \quad (\text{Ⅱ}.75)$$

由基矢$\mathbf{a}_1^*$，$\mathbf{a}_2^*$，$\mathbf{a}_3^*$张成的倒易点阵满足

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j^* = \delta_{ij} \quad (\text{Ⅱ}.76)$$

一个矢量x可表为

$$\mathbf{x} = x_1 a_1 + x_2 a_2 + x_3 a_3 = [a_1 \quad a_2 \quad a_3] \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \quad (\text{Ⅱ}.77)$$

也可用倒易基表为

$$\mathbf{x} = x_1^* a_1^* + x_2^* a_2^* + x_3^* a_3^* = [x_1^* \quad x_2^* \quad x_3^*] \begin{bmatrix} a_1^* \\ a_2^* \\ a_3^* \end{bmatrix} \quad (\text{Ⅱ}.77')$$

另正空间的度规张量

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} a_1 \cdot a_1 & a_1 \cdot a_2 & a_1 \cdot a_3 \\ a_2 \cdot a_1 & a_2 \cdot a_2 & a_2 \cdot a_3 \\ a_3 \cdot a_1 & a_3 \cdot a_2 & a_3 \cdot a_3 \end{bmatrix} \quad (\text{Ⅱ}.78)$$

则矢量x在正空间的分量x_1，x_2和x_3与其在倒易空间中的分量x_1^*，x_2^*和x_3^*之间，有以下关系

$$\begin{bmatrix} x_1^* \\ x_2^* \\ x_3^* \end{bmatrix} = \mathbf{G} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \quad (\text{Ⅱ}.79)$$

于是一矢量x的长度平方为

$$|\mathbf{x}|^2 = \mathbf{x}'\mathbf{x}^* \quad (\text{Ⅱ}.80)$$

现有任意斜角坐标系中两矢量x和y，在正交归一的笛卡尔坐标系中$\bar{x}$和$\bar{y}$，则

$$\bar{\mathbf{x}} = \mathbf{A}\mathbf{x} \quad (\text{Ⅱ}.81)$$

$$\bar{\mathbf{y}} = \mathbf{A}\mathbf{y}$$

其中A为变换矩阵，则

$$\mathbf{x} \cdot \mathbf{y} = \mathbf{x}'\mathbf{A}'\mathbf{A}\mathbf{y} = \mathbf{x}'\mathbf{G}\mathbf{y} = \mathbf{y}'\mathbf{G}\mathbf{x} \quad (\text{Ⅱ}.82)$$

如果两矢量中的一个，例如y是以倒基矢来表象，则

$$\bar{\mathbf{x}}\cdot\bar{\mathbf{y}} = (x_1a_1 + x_2a_2 + x_3a_3)\cdot(y_1a_1 + y_2a_2 + y_3a_3)$$
$$= x_1y_1 + x_2y_2 + x_3y_3$$
$$= \mathbf{x}'\mathbf{y}^*$$
$$= \mathbf{x}^{*\prime}\mathbf{y} \qquad (Ⅱ.83)$$

倒易矢量在材料科学中及本书中最大的应用，是以表示晶面的Miller指数，即晶面法线矢量在倒易空间中的分量，正好作为此晶面的Miller指数，例如晶面的法线矢量$\mathbf{m}'$在倒易空间中的分量为h，k，l，即

$$\mathbf{m}' = ha_1^* + ka_2^* + la_3^* \qquad (Ⅱ.84)$$

则此晶面的Miller指数为（hkl），即此晶面在正空间中3个轴上的截距分别为$1/h$，$1/k$和$1/l$。一个晶向x常用基矢表示，如

$$\mathbf{x} = u\mathbf{a}_1 + v\mathbf{a}_2 + w\mathbf{a}_3 \qquad (Ⅱ.85)$$

故一晶面和一晶向平行的条件是

$$\mathbf{m}'\mathbf{x} = 0 \qquad (Ⅱ.86)$$

正空间即为晶体的空间点阵，是具体的客观存在。而倒易空间是由正空间推导出来的，是抽象的客观存在，但在透射电镜的衍射斑点，正是倒易点阵的图形.

Ⅱ.5 不变线矢和不变法矢

在唯象理论的计算中，经常要研究那些在应变后长度和方向均不变的矢量，称为不变线矢。还要研究那些在应变后不转动不平移的面，称为法矢不变的面，其法矢则称不变法矢。为此先研究主轴坐标系，然后研究本征值和本征矢，最后得到不变线矢和不变法矢的有关规律。

可以证明，对于一个以非奇异矩阵表示的均匀应变，至少可找到一组三轴直交的坐标系，在应变后仍保持三轴直交，此坐标系称为主轴坐标系。若E为一非奇异的均匀应变矩阵，可用如下

步骤确定其主轴系。

1. 构成一个对称矩阵$B=E'E$;

2. 经旋转使B对角化，求出$(B)^{1/2}$;

3. 求$(B)^{1/2}$的三个本征矢，即构成主轴系。

以上步骤相当于解行列式方程

$$|E'E-\lambda^2 I|=0 \tag{Ⅱ.87}$$

其中λ的解λ_1，λ_2,λ_3(λ^2 的正值平方根）即为本征值。若E本身已是对称矩阵，则解

$$|E-\lambda I|=0 \tag{Ⅱ.88}$$

即可。这里的含义是：如果应变 E是对称矩阵，即不包含转动，只有畸变，则主轴系在应变前后方向不变（即重合，但基矢长度不同）。如果E是非对称的，即包含转动，严格地应称为相对位移张量，则应变前后的主轴系相对转动一定角度。

主轴方向的应变称为主应变，此时所有的切应变分量为0。主轴系为

$$(B)^{1/2}=\begin{pmatrix}\lambda_1 & 0 & 0\\ 0 & \lambda_2 & 0\\ 0 & 0 & \lambda_3\end{pmatrix} \tag{Ⅱ.89}$$

主应变为

$$[\varepsilon_{ij}]=\begin{pmatrix}\lambda_1-1 & 0 & 0\\ 0 & \lambda_2-1 & 0\\ 0 & 0 & \lambda_3-1\end{pmatrix} \tag{Ⅱ.90}$$

当发生旋转时，所有矢量均改变其方向，现在研究在线性变换（应变矩阵）作用下，方向不改变的矢量出现的可能性（矢量的长短可以改变），即探讨下式表示的方程存在的可能性

$$Ax=\lambda x \tag{Ⅱ.91}$$

x为一矢量，A为变换矩阵，λ为一标量，表变换前后矢量的长度变化，即矢量伸长的倍数。此方程叫本征值方程，λ叫矩阵A 的本征值，x叫属于本征值λ的本征矢。上式即

$$\left.\begin{aligned} a_{11}x_1+a_{12}x_2+a_{13}x_3&=\lambda x_1\\ a_{21}x_1+a_{22}x_2+a_{23}x_3&=\lambda x_2\\ a_{31}x_1+a_{32}x_2+a_{33}x_3&=\lambda x_3 \end{aligned}\right\} \tag{Ⅱ.92}$$

即

$$\left.\begin{aligned} (a_{11}-\lambda)x_1+a_{12}x_2+a_{13}x_3&=0\\ a_{21}x_1+(a_{22}-\lambda)x_2+a_{23}x_3&=0\\ a_{31}x_1+a_{32}x_2+(a_{33}-\lambda)x_3&=0 \end{aligned}\right\} \tag{Ⅱ.93}$$

或

$$(\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I})\mathbf{x}=0 \tag{Ⅱ.94}$$

此方程组有非平凡解的条件为行列式

$$\begin{vmatrix} (a_{11}-\lambda) & a_{12} & a_{13}\\ a_{21} & (a_{22}-\lambda) & a_{23}\\ a_{31} & a_{32} & (a_{33}-\lambda) \end{vmatrix}=0 \tag{Ⅱ.95}$$

由这一行列式方程可得到一个λ的三次方程，称为矩阵A的特征方程，或久期方程。由于复根必以共轭方式成对出现，故特征方程或者有一个实数解及一对复数解，或者有三个实数解（可能有重根）。换言之，一个线性变换至少有一个实的本征值及相应的矢量，也即是必可找到至少一个不转动的矢量。

可以证明，对于一个所有元素均为实数的对称矩阵A，其本征值均为实数λ_1，λ_2，λ_3，而且必能找到一个正交矩阵R，使A在作相似变换后为对角矩阵，且对角元素为λ_1，λ_2，λ_3，即

$$\mathbf{R}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{R}=\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0\\ 0 & \lambda_2 & 0\\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix} \tag{Ⅱ.96}$$

注意，并非所有矩阵均能对角化，而是只有①三个本征值互不相等，②正交矩阵、对称矩阵、厄米矩阵（Hermitian matrix）和酉矩阵（unitary matrix）才能对角化，后两种涉及虚数，本书不予讨论。经应变E后，一矢量x变为x，则$\mathbf{x}=\mathbf{E}\mathbf{x}$。若应变后x的方向和长度均不变，即

$$\mathbf{E}\mathbf{x}=\mathbf{x} \tag{Ⅱ.97}$$

则称$\mathbf{x}$为应变E 的不变线矢，即本征值为1的本征矢。并非所有应变均有不变线矢，例如单纯的三向膨胀应变就是没有。有不变线矢的充要条件是E 有数值为 1 的本征值。

在对马氏体转变的晶体学研究中，对应变前后不转动、不平移的晶面感兴趣。由于晶面用它的单位法向矢量表示，即对应变前后的不变法矢感兴趣。必须注意，这种法矢不变的面虽然不转动不平移，但该面本身却可以畸变，也即该面上的矢量既可转动（仍在该面上），也可以改变长度。因此，这里的不转动，是指不绕除法矢以外的轴转动，否则会引起法矢旋转。这里的不平移是指不移出该面所在的无限大几何平面之处，否则法矢的长度要变化。

首先要证明在应变中，法矢的变换为

$$\mathbf{n}' = \mathbf{n}'\mathbf{E}^{-1} \qquad (\text{Ⅱ}.98)$$

其中$\mathbf{n}'$和$\mathbf{n}$分别为应变前后的法矢，$\mathbf{E}^{-1}$为应变E的逆矩阵。这个式子说明，法矢的变换与线矢的变换互逆。这一点可由图Ⅱ.4的示意，得到一个感性的概念。

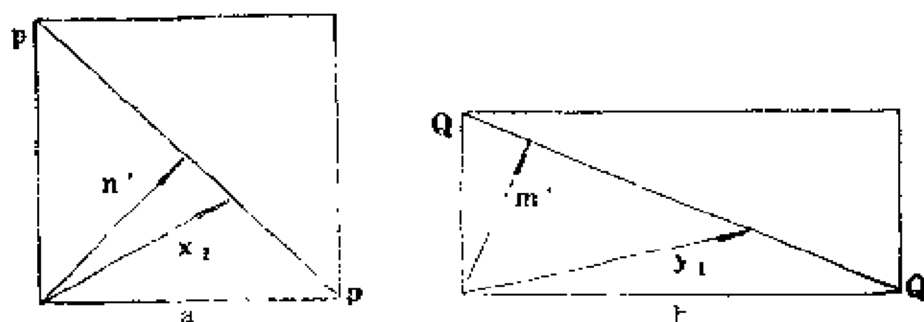


图 Ⅱ.4 形变前 (a) 的线矢$\mathbf{x}_1$与法矢$\mathbf{n}'$在形变后 (b) 变为$\mathbf{y}_1$和$\mathbf{m}'$（显示出二者向不同方向转动）

现在来证明（Ⅱ.98）式中的变换。如图Ⅱ.4所示应变前的面为PP面，应变后变为QQ面。PP面上某点的位矢为$\mathbf{x}_1$，而$\mathbf{x}_2$和$\mathbf{x}_3$为PP面上两不共线的矢量，应变后相应的矢量为$\mathbf{y}_1$，$\mathbf{y}_2$和

$\mathbf{y}_3$，即

$$\left.\begin{aligned}\mathbf{y}_1&=\mathbf{E}\mathbf{x}_1\\ \mathbf{y}_2&=\mathbf{E}\mathbf{x}_2\\ \mathbf{y}_3&=\mathbf{E}\mathbf{x}_3\end{aligned}\right\} \qquad (\text{Ⅱ}.99)$$

因PP面上任一点的位矢$\mathbf{x}$必写作

$$\mathbf{x}=\mathbf{x}_1+a\mathbf{x}_2+b\mathbf{x}_3$$

其中a，b为适当选取的两参数。QQ面上任一点的位矢必写作

$$\mathbf{y}=\mathbf{y}_1+c\mathbf{y}_2+e\mathbf{y}_3 \qquad (\text{Ⅱ}.100)$$

其中c，e为适当选取的参数。PP面的方程为

$$\mathbf{n}'\mathbf{x}=d=1 \qquad (\text{Ⅱ}.101)$$

其中$\mathbf{n}'$为PP面的单位法矢（以后简称法矢）；$\mathbf{x}$为PP 面上各点的位矢，换言之，$\mathbf{x}$的末端表PP面；d为原点至PP 面的垂直距离。

1. 设$\mathbf{m}'=\mathbf{n}'\mathbf{E}^{-1}$，求证$\mathbf{m}'$为QQ面之法矢。

证：令$\mathbf{x}=\mathbf{x}_1+a\mathbf{x}_2+b\mathbf{x}_3$

且$\mathbf{n}'\mathbf{x}_2=\mathbf{n}'\mathbf{x}_3=0$　（$\because \mathbf{n}'\perp\mathbf{x}_2$，$\mathbf{x}_3$）

则$\mathbf{n}'\mathbf{x}=\mathbf{n}'\mathbf{x}_1=d$

$\because \mathbf{m}'=\mathbf{n}'\mathbf{E}^{-1}$，即$\mathbf{m}'\mathbf{E}=\mathbf{n}'$

又$\mathbf{y}=\mathbf{E}\mathbf{x}=\mathbf{E}\mathbf{x}_1+a\mathbf{E}\mathbf{x}_2+b\mathbf{E}\mathbf{x}_3$

$=\mathbf{y}_1+a\mathbf{y}_2+b\mathbf{y}_3$

但①$\mathbf{m}'\mathbf{y}_2=\mathbf{m}'\mathbf{E}\mathbf{x}_2=\mathbf{n}'\mathbf{x}_2=0$

但②$\mathbf{m}'\mathbf{y}_3=\mathbf{m}'\mathbf{E}\mathbf{x}_3=\mathbf{n}'\mathbf{x}_3=0$

且③$\mathbf{m}'\mathbf{y}=\mathbf{m}'\mathbf{E}\mathbf{x}=\mathbf{n}'\mathbf{x}=d=1$

以上①②和③说明$\mathbf{m}'$垂直于QQ面且为单位矢量，故为QQ面之法矢。

2. 设$\mathbf{m}'$为QQ面之法矢，求证$\mathbf{m}'=\mathbf{n}'\mathbf{E}^{-1}$

证：因$\mathbf{m}'$为QQ面法矢，则QQ面方程为

$$\mathbf{m}'\mathbf{y}=d=1 \qquad (\text{Ⅱ}.102)$$

其中$\mathbf{y}$为末端在QQ面上的任一矢量，则

$$\mathbf{m}'\mathbf{y}=\mathbf{m}'\mathbf{E}\mathbf{x}=d=1$$

而PP面方程为$\mathbf{n}'\mathbf{x}=d=1$，比较可得

$$\mathbf{m}'\mathbf{E}=\mathbf{n}'$$

即

$$\mathbf{m}'=\mathbf{n}'\mathbf{E}^{-1}$$

证毕。

在应变后不变的法矢n′，

$$\mathbf{n}'=\mathbf{n}'\mathbf{E}^{-1}=\mathbf{n}'\mathbf{E} \qquad (\text{Ⅱ}.103)$$

称为不变法矢。并非所有的应变均有不变法矢，只有 $(\mathbf{E}^{-1})'$有为 1 的本征值时，才存在不变法矢。

Ⅱ.6 平面不变应变

平面不变应变，是指物体在经受该应变后，能够找到一个平面，该面上的任何矢量，在此应变前后没有方向或长度上的变化(此面及其上的矢量可以平动)。平面不变应变张量 D 必可写作如下形式

$$\mathbf{D}=\mathbf{I}+\mathbf{d}\mathbf{p}' \qquad (\text{Ⅱ}.104)$$

其中p′为不变面的法矢，d为该面的位移矢量，若两者的矩阵形式表为（Ⅱ.30），则

$$\mathbf{D}=\begin{bmatrix} d_1p_1+1 & d_1p_2 & d_1p_3 \\ d_2p_1 & d_2p_2+1 & d_2p_3 \\ d_3p_1 & d_3p_2 & d_3p_3+1 \end{bmatrix} \qquad (\text{Ⅱ}.105)$$

最简单的平面不变应变为单轴拉伸（d ∥ p′）和简单切变(d⊥p′)，在一般情况下，d和p′斜交，如图Ⅱ.5所示。对于平面不变应变D，所有在不变面p′上的矢量均为不变线矢，即若

$$\mathbf{p}'\mathbf{x}=0 \qquad (\text{Ⅱ}.106)$$

则

$$\begin{aligned} \triangle\mathbf{x}&=\mathbf{D}\mathbf{x}-\mathbf{x}=(\mathbf{I}+\mathbf{d}\mathbf{p}')\mathbf{x}-\mathbf{I}\mathbf{x} \\ &=\mathbf{d}\mathbf{p}'\mathbf{x}=\mathbf{d}(\mathbf{p}'\mathbf{x})=0 \end{aligned} \qquad (\text{Ⅱ}.107)$$

即

$$\mathbf{D}\mathbf{x}=\mathbf{x} \qquad (\text{Ⅱ}.108)$$

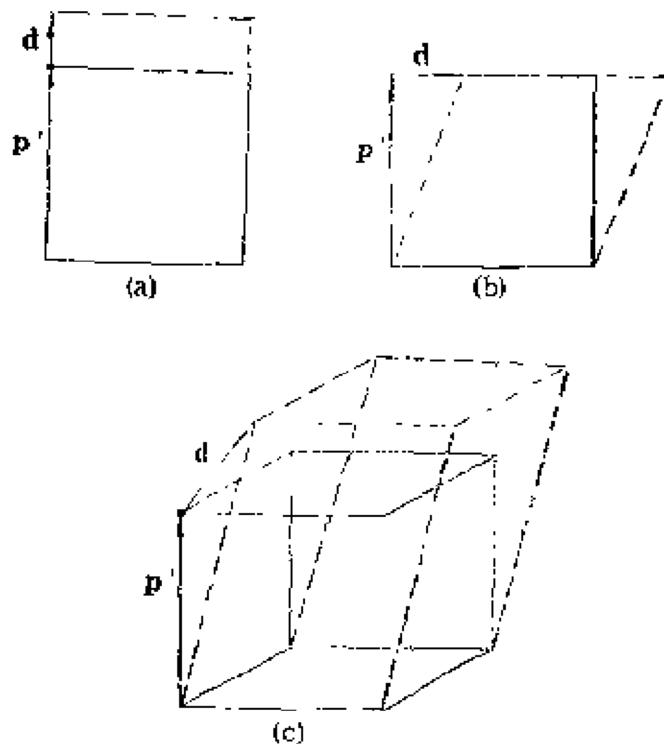


图 Ⅱ.5 平面不变应变中的 (a) 单轴拉伸，(b) 简单切变和 (c) 一般情况p′为不变面的法矢，d为不变面的位移矢量

所有包含d的平面的法矢q′均为不变法矢，即若

$$\mathbf{q}'\mathbf{d}=0 \tag{Ⅱ.109}$$

则

$$\begin{aligned}\Delta\mathbf{q}' &= \mathbf{q}'\mathbf{D}^{-1}-\mathbf{q}' \\ &= q'\left[\mathbf{I}-\frac{\mathbf{d}\mathbf{p}'}{1+\mathbf{p}'\mathbf{d}}\right]-\mathbf{q}' \\ &= -\frac{(\mathbf{q}'\mathbf{d})\mathbf{p}'}{1+\mathbf{p}'\mathbf{d}}=0\end{aligned} \tag{Ⅱ.110}$$

即

$$\mathbf{q}'\mathbf{D}^{-1}=\mathbf{q}' \tag{Ⅱ.111}$$

对于一般的线矢x，经D后的变化为

$$\triangle \mathbf{x}=(\mathbf{p}'\mathbf{x})\mathbf{d} \tag{Ⅱ.112}$$

位移方向为d的方向，位移大小正比于x在p′上的投影值。对于一般的法矢，其位移为

$$\Delta \mathbf{q}' = -\frac{\mathbf{q}'\mathbf{d}}{1+\mathbf{p}'\mathbf{d}}\mathbf{p}' \qquad (Ⅱ.113)$$

此位移沿$\mathbf{p}'$的方向，大小正比于$\mathbf{q}'$在$\mathbf{d}$上的投影值。

加果物体在经历应变$\mathbf{L}$后，保持一个矢量$\mathbf{x}$不变，则此应变称为直线不变应变，即

$$\mathbf{L}\mathbf{x} = \mathbf{x} \qquad (Ⅱ.114)$$

但这一条件不能确定$\mathbf{L}$，或者换句话说，能使$\mathbf{x}$保持不变的应变不止一个。为了完全确定这一直线不变应变，还需另加限制条件，例如有一个不变法矢$\mathbf{n}'$，即

$$\mathbf{n}'\mathbf{L}^{-1} = \mathbf{n}' = \mathbf{n}'\mathbf{L} \qquad (Ⅱ.115)$$

这两条件限定了此直线不变应变，但满足这两条件的不必然是直线不变应变。因为有很多平面不变应变也满足这两个条件，只当$\mathbf{L}$不是平面不变应变时，$\mathbf{L}$才被这两条件完全唯一地确定。现在用平面不变应变来刻画直线不变应变。设$\mathbf{D}_1$和$\mathbf{D}_2$为两平面不变应变，不变面法矢和位移矢量分别为$\mathbf{p}'_1$，$\mathbf{p}'_2$和$\mathbf{d}_1$，$\mathbf{d}_2$。令

$$\mathbf{L} = \mathbf{D}_1\mathbf{D}_2 \qquad (Ⅱ.116)$$

若$\mathbf{p}'_1 = \mathbf{p}'_2$或$\mathbf{d}_1 = \mathbf{d}_2$，则$\mathbf{L}$是一个新的平面不变应变。若$\mathbf{p}'_1 \neq \mathbf{p}'_2$且$\mathbf{d}_1 \neq \mathbf{d}_2$，则$\mathbf{L}$是一个直线不变应变。此直线不变应变的不变线矢为$\mathbf{p}'_1$和$\mathbf{p}'_2$两不变面的交线，即

$$\mathbf{x} = \mathbf{p}'_1 \times \mathbf{p}'_2 \qquad (Ⅱ.117)$$

而不变法矢$\mathbf{n}'$为与$\mathbf{d}_1$和$\mathbf{d}_2$均垂直的矢量，即法矢不变的面同时包含$\mathbf{d}_1$和$\mathbf{d}_2$，即

$$\mathbf{n}' = \mathbf{d}_1 \times \mathbf{d}_2 \qquad (Ⅱ.118)$$

在马氏体转变的晶体学唯象理论中，有时会遇到将一个已知的直线不变应变$\mathbf{L}$分解为两个平面不变应变的乘积的问题。现在证明：若预先给定的两个平面$\mathbf{p}'_1$和$\mathbf{p}'_2$均含有此直线不变应变$\mathbf{L}$的不变线矢$\mathbf{x}$，则$\mathbf{L}$可以唯一地分解为两个平面不变应变$\mathbf{D}_1$和$\mathbf{D}_2$，其不变面分别为预先给定的平面$\mathbf{p}'_1$和$\mathbf{p}'_2$。现在直接找出$\mathbf{D}_1$和$\mathbf{D}_2$，并证明其乘积与$\mathbf{L}$（所产生的应变）等效。

1. 在$\mathbf{p}'_2$面上所有点经历$\mathbf{L}$后的位移，可以由以$\mathbf{p}'_1$为不变面

的一个平面不变应变D_1来完成。先找出L在p_1'面上引起的应变，再找出引起相同应变的平面不变应变D_1。令y_2为p_1'面上不同于x的任一矢量，则

$$p_1'y_2 = p_1'x = 0 \qquad (Ⅱ.119)$$

在p_1'上的任意矢量z，必可写作y_2和x的线性组合，即

$$z = ay_2 + bx \qquad (Ⅱ.120)$$

其中a和b为两个标量参数。由L引起的z的位移为

$$\begin{aligned}\triangle z = Lz - z &= a[Ly_2 - y_2] + b[Lx - x] \\ &= a[Ly_2 - y_2] \qquad (Ⅱ.121)\end{aligned}$$

可见p_1'上任意矢量经L后的位移具有相同方向。又因$n'L^{-1} = n' = n'L$，则

$$n'\triangle z = n'[Lz - z] = n'z - n'z = 0 \qquad (Ⅱ.122)$$

可见这些位移矢量均在L的不变法矢n'所代表的平面上。

2. 一个以p_1'为不变面，位移矢量的方向为$[Lz - z] = a[Ly_2 - y_2]$的平面不变应变，必然具有如下形式

$$D_1 = I + f[Ly_2 - y_2]p_1' \qquad (Ⅱ.123)$$

其中f为标量参数。又因D和L应对p_1'面上的任一矢量z引起相同位移，因而

$$D_1z - z = a[Ly_2 - y_2] \qquad (Ⅱ.124)$$

因而得

$$f[Ly_2 - y_2]p_1'z = a[Ly_2 - y_2] \qquad (Ⅱ.125)$$

$$f[Ly_2 - y_2]p_1'[ay_2 + bx] = a[Ly_2 - y_2] \qquad (Ⅱ.126)$$

于是（注意：x是p_1'和p_2'的交线，因而x⊥p_1'，p_2'）

$$f = \frac{1}{p_1'y_2} \qquad (Ⅱ.127)$$

则

$$D_1 = I + \frac{[Ly_2 - y_2]p_1'}{p_1'y_2} \qquad (Ⅱ.128)$$

从而求出L所分解在p_1'面上的一个平面不变应变因子D_1，另一个因子D_2是以生成p_1'的面$p_2'L^{-1}$为不变面的平面不变应变。D_2应把

p_1'上的点应变至其最终位置上。若p_1'与$p_2'L^{-1}$是不同的面，则上述的建立D_1的推理过程，可用于建立D_2。

3．令y_1为p_1'上某一个不同于x的矢量，则p_1'上的任一矢量u必写作

$$u = cy_1 + dx \qquad (Ⅱ.129)$$

其中c和d为标量参数。于是

$$Lu - u = c[Ly_1 - y_1] \qquad (Ⅱ.130)$$

以$P_2'L^{-1}$为不变面的平面不变应变通常具有如下形式

$$D_2 = I + q[Ly_1 - y_1]q_2'L^{-1} \qquad (Ⅱ.131)$$

对于在p_1'上的任一矢量u，D_2和L应产生相同的位移矢量，(因D_1对p_1'上的矢量无影响)，即

$$c[Ly_1 - y_1] = q[Ly_1 - y_1]p_2'L^{-1}u \qquad (Ⅱ.132)$$

$$c = cqp_2'L^{-1}y_1 \qquad (Ⅱ.133)$$

得

$$q = \frac{1}{p_2'L^{-1}y_1} \qquad (Ⅱ.134)$$

因而

$$D_2 = I + \frac{[Ly_1 - y_1]p_2'L^{-1}}{(p_2'L^{-1}y_1)} \qquad (Ⅱ.135)$$

从而得到L的分解

$$L = \left\{I + [Ly_1 - y_1]\frac{p_2'L^{-1}}{p_2'L^{-1}y_1}\right\}\left\{I + [Ly_2 - y_2]\frac{p_1'}{p_1'y_2}\right\} \qquad (Ⅱ.136)$$

满足

$$\left.\begin{aligned} D_2D_1y_1 &= Ly_1 \\ D_2D_1y_2 &= Ly_2 \\ D_2D_1x &= x \end{aligned}\right\} \qquad (Ⅱ.137)$$

y_1，y_2是两个线性无关的矢量，这3个式子完全说明（D_1D_2）和L等效，都是以x为不变线矢的直线不变应变。

上面是预先给定p_1'和p_2'后的分解。下面讨论预先给定两个位

移矢量d_1和d_2后，直线不变应变L唯一地分解为两平面不变应变D_1和D_2（分别以d_1和d_2为位移矢量）的情况。按照上面类似的推理过程，令m_1'和m_2'为不同于L的不变法矢n'的法矢，所代表的面分别包含d_1和d_2（d_2不同于d_1及$L^{-1}d_1$），则得

$$L=\left\{I-Ld_2\frac{(m_1'L^{-1}-m_1')}{(m_1'{}'d_2)}\right\}\left\{I-d_1\frac{(m_2'{}'L^{-1}m_2'{}')}{(m_2'L^{-1}d_1)}\right\} \tag{Ⅱ.138}$$

因而

$$D_2=I-Ld_2\frac{(m_1'L^{-1}-m_1')}{m_1'{}'} \tag{Ⅱ.139}$$

$$D_1=I-d_1\frac{(m_2'L^{-1}-m_1')}{m_2'{}'L^{-1}d_1} \tag{Ⅱ.140}$$

即

$$L=D_2D_1 \tag{Ⅱ.141}$$

若D_2为简单切变，则p_2和d_2不受D_2的影响只因D_1而位移，也即是L引起的位移，于是

$$\begin{aligned}L&=D_2D_1\\&=(I+Ld_2p_2'L^{-1})(I+d_1p_1')\\&=(LL^{-1}+Ld_2p_2'L^{-1})D_1\\&=L(I+d_2p_2')L^{-1}D_1\\&=LD_2L^{-1}D_1\end{aligned} \tag{Ⅱ.142}$$

也即是

$$I=D_2L^{-1}D_1 \tag{Ⅱ.143}$$

$$D_2^{-1}=L^{-1}D_1 \tag{Ⅱ.144}$$

$$D_2^{-1}\quad D_1^{-1}\quad=L^{-1} \tag{Ⅱ.145}$$

$$L=D_1D_2=(I+d_1p_1')(I+d_2p_2') \tag{Ⅱ.146}$$

此处d_1，d_2，p_1'，p_2'均为在L应变前的位置。可见在这种情况下，两分解因子D_1和D_2的顺序是可调换的。归纳上面的式子为

$$L=D_1D_2=(I+d_1p_1')(I+d_2p_2')$$

$$=\left\{I+[Ly_2-y_1]\frac{p_1'}{(p_1'y_2)}\right\}\left\{I+[y_1-L^{-1}y_1]\frac{p_2'}{(p_2'L^{-1}y_1)}\right\}$$

$$=\left\{I-d_1\frac{(m_2'L^{-1}-m_2')}{(m_2{}'L^{-1}d_1)}\right\}\left\{I-d_2\frac{(m_1'-Lm_1')}{(m_1'd_2)}\right\} \quad (\text{I}.147)$$

其中

$$d_1=\frac{[Ly_2-y_2]}{(p_1'y_2)} \quad (\text{I}.148)$$

$$d_2=\frac{[y_1-L^{-1}y_1]}{(p_2'L^{-1}y_1)} \quad (\text{I}.149)$$

当$D_2=(I+d_2p_2')$为简单切变时，还可得到更多的有用结果．注意，简单切变矩阵的行列式值$\det D_2$为1。因为简单切变$p_2'd_2=0$，得

$$\det D_2=1+p_2'd_2=1 \quad (\text{I}.150)$$

若D_2为简单切变，则

$$Ld_2=D_1D_2d_2=(I+d_1p_1')d_2 \quad (\text{I}.151)$$

$$=d_2+d_1(p_1'\ \ d_2)$$

即

$$d_1=\frac{Ld_2-d_2}{(p_1'd_2)} \quad (\text{I}.152)$$

又因

$$p_1'L^{-1}=p_1'(I+d_1p_1')(I+d_2p_2')$$

$$=\{p_1'+(I+d_2p_1'\}(I+d_2p_2')$$

$$=kp_1'\ \ (I+d_2p_2')$$

$$=kp_1'\ \ (kp_1{}'d_2)\ \ p_2' \quad (\text{I}.153)$$

其中$k=\det(I+d_1p_1')=\det L$ (I.154)

于是$p_1'\ (L-kI)=-(kp_1'd_2)\ p_2'$ (I.155)

若 $p_1'd\neq0$，则

$$p_2'\ /\!/\ p_1'L-kp_1' \quad (\text{I}.156)$$

因为

$$L=(I+d_1p_1')\ \ (I+d_2p_2') \quad (\text{I}.157)$$

于是

$$L^{-1}=(D_1D_2)^{-1}=D_2^{-1}D_1^{-1}$$

$$=(I-d_2p_2')\left(I-\frac{d_1p_1'}{k}\right) \qquad (Ⅱ.158)$$

则

$$p_2'L^{-1}=p_2'\left(I-\frac{d_1p_1'}{k}\right)$$

$$=p_2'-\frac{(p_2'd_1)}{k}p_1' \qquad (Ⅱ.159)$$

所以

$$p_1' \,/\!/\, p_2'\ (L^{-1}-I) \qquad (Ⅱ.160)$$

因为p_1'和p_2'均应为归一化矢量，故在求得其方向后立即可求得该矢量。

（本书著者邓永瑞）简介



北京科技大学材料科学与工程系教授，美国伦塞勒理工学院哲学博士。教授课程：固态相变，材料科学中电脑应用（研究生水平）；金属学，专业英语，电脑基础（大学生水平）。研究领域：高强高韧钛合金，形状记忆铜合金，增韧结构陶瓷；离子放电和离子溅射镀层，金属和陶瓷间的渐变结合界面；马氏体转变。